疏水表面滑移流动及减阻特性的 格子Boltzmann方法模拟*

黄桥高¹⁾²⁾ 潘光^{1)†} 宋保维¹⁾

(西北工业大学航海学院,西安 710072)
 (九州大学,应用力学研究所,日本福冈 816-8580)
 (2013年10月18日收到;2013年11月12日收到修改稿)

采用格子 Boltzmann 方法研究了固体壁面对流体的作用强度与其润湿性的关系,在此基础上进一步模拟 了疏水表面微通道内的流体流动,获得了润湿性对疏水表面滑移流动及减阻特性的影响规律,证实了疏水表 面表观滑移的存在性并揭示了其产生机理.结果表明,疏水性作用在疏水表面的近壁区诱导了一个低密度层, 而表观滑移则发生在低密度层上.表观滑移是疏水表面具有减阻作用的直接原因,减阻效果随滑移长度的增 大而增大.对于特定的流体系统,滑移长度是疏水表面的固有属性,仅是壁面润湿性的单一函数,而与流动本 身的性质无关.

关键词: 疏水表面, 滑移流动, 减阻机理, 格子 Boltzmann 方法 PACS: 47.11.Qr, 02.60.Cb, 47.85.Dh DOI: 10.7498/aps.63.054701

1引言

在经典宏观流体力学的教科书和科技论文中, 几乎都有一个相同的重要假设:在固体和流体的 交界面上没有滑移,即固体和流体在交界面上没有 相对运动,这就是所谓的无滑移边界条件.但是对 于微纳米尺度流动,系统极大的面体比使得表面属 性成为影响流动的主导因素,即使是流体在固体 壁面纳米量级的滑移也会给流体输运带来重要影 响^[1,2].

流体在固体壁面发生的滑移现象已得到了理 论和分子动力学模拟研究的支持^[3-6]. Cao等^[7] 从分子动力学行为、边界条件、理论模型等方面对 微/纳电子机械系统(MEMS/NEMS)中流固界面 的滑移流动作了较全面的综述,并讨论了流固分子 种类、粗糙度、润湿性、温度、压力、流体黏度等因素 对滑移流动的影响.他还基于分子动力学方法研究 了表面润湿性对滑移流动的影响,获得了接触角与 滑移量之间的关系^[8].近几年的一些实验发现液 体在疏水表面容易产生较大的滑移量^[9-10].这可 能与疏水表面的诸多应用,如减小流体阻力、降低 流噪声、海洋防污等有直接关系. 但由于实验条件 和测量精度的限制,对液体在疏水表面滑移现象的 规律及其机理的认识还非常有限. 格子 Boltzmann 方法(LBM)以微观粒子的碰撞和迁移运动为基础, 没有连续假设的要求,在原理上可以用于宏观模 型失效的小尺度流体系统^[11-13]. Harting等^[14]、 Chen 等^[15]、Zhang 等^[16] 均采用格子 Boltzmann 方 法对微通道内流体流动进行了模拟研究,证明了无 滑移的润湿边界条件能产生表观滑移,指出滑移流 动主要受流体与固体壁面之间相互作用强度的影 响. 但他们的研究都没有涉及滑移量与疏水表面减 阻效果的关系.本文采用格子 Boltzmann 方法对疏 水表面的流体流动进行数值模拟,分析疏水表面滑 移流动的产生机理及滑移对疏水表面减阻特性的 影响.

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 51279165, 51109178)资助的课题.

[†]通讯作者. E-mail: panguang601@163.com

^{© 2014} 中国物理学会 Chinese Physical Society

2 数值方法

2.1 格子 Boltzmann 方法

格子 Boltzmann 方法是近年来发展起来的一 类介观层次模拟流体流动的方法,它通过描述离散 流体粒子分布函数在固定格子上的碰撞和迁移过 程来获得宏观流动信息,其演化方程如下^[17]:

$$f_{\alpha}(\boldsymbol{x} + \boldsymbol{e}_{\alpha}\delta_{t}, t + \delta_{t}) - f_{\alpha}(\boldsymbol{x}, t)$$

= $-\frac{1}{\tau} \left[f_{\alpha}(\boldsymbol{x}, t) - f_{\alpha}^{(eq)}(\boldsymbol{x}, t) \right],$ (1)

式中, $f_{\alpha}(\boldsymbol{x},t)$ 为t时刻位于 \boldsymbol{x} 处的以 \boldsymbol{e}_{α} 速度运动 的流体粒子的分布函数, $f_{\alpha}^{(eq)}(\boldsymbol{x},t)$ 为粒子平衡态 分布函数, τ 为无量纲松弛时间.格子Boltzmann 方程的左端项表示粒子的迁移过程, 右端项表示粒 子的碰撞过程, 并认为碰撞的效应是改变f使其趋 于平衡态分布 $f^{(eq)}$.在D2Q9模型中^[17], 平衡态分 布函数如下:

$$f_{\alpha}^{(\text{eq})}(\boldsymbol{x},t) = \rho \omega_{\alpha} \left[1 + \frac{\boldsymbol{e}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{u}}{c_{\text{s}}^{2}} + \frac{(\boldsymbol{e}_{\alpha} \cdot \boldsymbol{u})^{2}}{2c_{\text{s}}^{4}} - \frac{u^{2}}{2c_{\text{s}}^{2}} \right]. \quad (2)$$

离散速度配置如下:

$$\begin{bmatrix} e_0, e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6, e_7, e_8 \end{bmatrix}$$

=
$$\begin{bmatrix} 0 \ 1 \ 0 \ -1 \ 0 \ 1 \ -1 \ -1 \ 1 \\ 0 \ 0 \ 1 \ 0 \ -1 \ 1 \ 1 \ -1 \ -1 \end{bmatrix} c, \qquad (3)$$

式中, $c = \delta_x / \delta_t$ 为格子速度, δ_x , δ_t 分别为空间步长 和时间步长; $c_s = c / \sqrt{3}$ 为格子声速; 权系数

$$\omega_{\alpha} = 4/9(\alpha = 0), \quad \omega_{\alpha} = 1/9(\alpha = 1, 2, 3, 4),$$

 $\omega_{\alpha} = 1/36(\alpha = 5, 6, 7, 8).$

流体的宏观密度、速度如下:

$$\rho = \sum_{\alpha} f_{\alpha}, \quad \boldsymbol{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{\alpha} \boldsymbol{e}_{\alpha} f_{\alpha}. \tag{4}$$

宏观压力由状态方程 $p = \rho c_s^2$ 直接给出.

2.2 Shan-Chen 模型

为了引入微观分子间作用力, Shan和Chen提 出了伪势模型^[18,20], 它易于耦合微流动问题中占 主导作用的微观力, 能够反映流体动力学的物理 本质, 从而很好地拓宽了格子Boltzmann方法在 复杂润湿性表面微流动模拟方面的应用范围. 在 Shan-Chen模型中, *x* 处的流体粒子受到周围流体 粒子和固体壁面的作用力分别为

$$F_{\text{int}}(\boldsymbol{x},t) = -G\psi(\boldsymbol{x},t)\sum_{\alpha=1}^{8} w_{\alpha}\psi(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_{\alpha}\delta_{t},t)\boldsymbol{e}_{\alpha}, \quad (5)$$

$$\boldsymbol{F}_{\mathrm{ads}}(\boldsymbol{x},t) = -G_{\mathrm{s}}\psi(\boldsymbol{x},t)\sum_{\alpha=1}^{8} w_{\alpha}\mathrm{swi}(\boldsymbol{x}+\boldsymbol{e}_{\alpha}\delta_{t})\boldsymbol{e}_{\alpha}.$$
 (6)

(5) 式中*G*是流体粒子之间的相互作用强度, (6) 式 中*G*_s称为吸附参数, 是固体壁面对流体粒子的作 用强度. 在确定参数*G*的基础上改变*G*_s可以很容 易地控制固体壁面的润湿性. swi是指示器函数, 当 $x + e_{\alpha}\delta_t$ 为固体壁面格点时取值1, 为流体格点时 取值0. w_{α} 是不同方向作用力的权系数, 其值为

$$w_{\alpha} = 1/9(\alpha = 1, 2, 3, 4),$$

 $w_{\alpha} = 1/36(\alpha = 5, 6, 7, 8).$

 $\psi(x,t)$ 是相互作用势函数,应该满足关于密度 ρ 单 调递增且有界,本文采用的相互作用势函数为

$$\psi(\boldsymbol{x},t) = \rho_0 [1 - \exp(-\rho/\rho_0)],$$

Shan-Chen模型是通过改变平衡态分布函数 中的平衡态速度**u***来体现粒子间相互作用力的 影响:

$$\rho(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{\alpha=0}^{\circ} f_{\alpha}(\boldsymbol{x}, t),$$

$$\rho(\boldsymbol{x}, t) \boldsymbol{u}^{*}(\boldsymbol{x}, t) = \sum_{\alpha=0}^{8} \boldsymbol{e}_{\alpha} f_{\alpha}(\boldsymbol{x}, t)$$

$$+ \tau(\boldsymbol{F}_{\text{int}} + \boldsymbol{F}_{\text{ads}}). \quad (7)$$

此时流体的状态方程为

$$p = \rho c_{\rm s}^2 + \frac{G}{6} \psi^2. \tag{8}$$

3 疏水表面流体流动特性数值模拟

3.1 滑移对疏水表面流体流动特性的影响 分析

首先从理论上分析滑移对疏水表面流体流动 特性的影响.对于由压力梯度驱动槽道中流体的 Poiseuille流动,假设槽道的上下壁面为疏水表面, 产生的滑移速度为u_s,槽道内压力降产生的驱动力 全部用来克服壁面摩擦力.则流体在槽道截面上的 速度分布为

$$u = \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} y^2 + u_{\rm s} - \frac{h^2}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x},\tag{9}$$

式中, $\left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right)$ 为流体沿流动方向的压力梯度, h为槽道高度的一半.

根据Navier滑移公式,滑移速度的大小正比于 流体在壁面处的剪切率,即

$$u_{\rm s} = b \cdot \left. \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}y} \right|_{\rm wall} = b \cdot \frac{\tau_{\rm w}}{\mu} = \frac{bh}{\mu} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} \right). \quad (10)$$

式中,b为滑移长度, τ_w 为壁面剪应力.

将 (10) 式代入 (9) 式得
$$u = \frac{1}{2\mu} \frac{\partial p}{\partial x} \left(y^2 - h^2 - 2bh \right). \tag{11}$$

进一步可以得到疏水表面槽道内流体的平均 速度为

$$u_{\text{average}}^{\text{slip}} = \frac{1}{2h} \int_{-h}^{h} u \, \mathrm{d}y$$
$$= \frac{h^2}{\mu} \left(-\frac{\partial p}{\partial x} \right) \left(\frac{1}{3} + \frac{b}{h} \right). \quad (12)$$

而无滑移表面槽道内流体的平均速度为

$$u_{\text{average}}^{\text{no-slip}} = \frac{h^2}{3\mu} \left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right).$$
 (13)

如果令 $u_{\text{average}}^{\text{slip}} = u_{\text{average}}^{\text{no-slip}}$,可以得到

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\rm slip} / \left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\rm no-slip} = \frac{h}{h+3b}.$$
 (14)

根据上面的推导,可以从两个方面理解滑移对 疏水表面流体流动特性的影响:若疏水表面发生滑 移流动,则滑移长度b > 0.一方面,当槽道的压力 梯度一定时, $u_{average}^{slip} > u_{average}^{no-slip}$,表明同样的驱动 力,流体在疏水表面槽道内的平均速度要大;另一 方面,当槽道的流量(即平均速度)一定时,

$$\left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\rm slip} \Big/ \left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\rm no-slip} < 1,$$

表明驱动同样的流体, 疏水表面槽道所需的驱动力 要小.显然, 无论是流体的平均速度增大还是所需 的驱动力减小, 都说明了疏水表面具有一定的减阻 作用.如果采用第二种方法来定量描述疏水表面的 减阻效果, 可以定义无量纲压降比

$$\eta = \frac{\left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\text{no-slip}} - \left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\text{slip}}}{\left(-\frac{\partial p}{\partial x}\right)_{\text{no-slip}}} = \frac{3b}{h+3b}.$$
 (15)

无量纲压降比反映了流量一定的情况下, 疏水 表面槽道和无滑移表面槽道压力梯度的差异. 当 η > 0时, 表明疏水表面具有减阻效果, η越大, 减 阻效果越明显. 此外, (15)式还说明了滑移长度与 减阻效果之间存在——对应关系, 而且滑移长度越 大, 减阻效果越大. 可以认为, 滑移是疏水表面具 有减阻作用的直接原因, 而减阻效果可以直接用滑 移长度来表征.

上面的理论推导中作了一个重要假设,即疏水表面能够产生滑移流动.下面将通过格子Boltzmann方法模拟疏水表面的流体流动,证实滑移流动的存在并揭示其产生机理.

3.2 疏水表面润湿性数值模拟

固体壁面的润湿性用接触角来定量描述. 在G一定的情况下 (G = -5.8),可以通过改变 G_s 来控 制固体壁面的润湿性. 计算域为500×500格子单 位的矩形空间,一个格子单位大约对应1.2 µm实 际物理尺度,无量纲松弛时间 $\tau = 1.0$,重力加速度 $g = 0.5 \times 10^{-6}$,左右边界采用周期性边界格式,上 下壁面采用无滑移反弹格式,一个直径为150的圆 形液滴置于下壁面中间位置. 由于固体壁面对流体 的作用力不同,体系达到平衡时液滴呈现不同的形 态. 图1是不同吸附参数下液滴在固体壁面上的形 态及接触角值. 将 $\theta = |G_s|$ 的值进行拟合 (如图2), 可以发现在G一定的情况下, $\theta = |G_s|$ 呈线性关系, 且 θ 随 | G_s |增大而减小. 拟合后直线表达式为

$$\theta = -32.09 |G_{\rm s}| + 184.74. \tag{16}$$

由 (16) 式可以认为: 当2.952 < $|G_{\rm s}|$ < 5.757 时,0° < θ < 90°,固体壁面为亲水表面;当 0.148 < $|G_{\rm s}|$ < 2.952时,90° < θ < 180°,固体 壁面为疏水表面;特别地,当0.148 < $|G_{\rm s}|$ < 1.083 时,150° < θ < 180°,固体壁面为超疏水表面.

3.3 疏水表面滑移流动及减阻特性数值 模拟

计算域为121×201格子单位的矩形通道, 左右 边界采用周期性边界格式, 上下边界为固定壁面, 采用无滑移反弹格式, 流体在压力梯度驱动下沿 通道 *x* 方向流动. 改变 Shan-Chen 模型中的吸附参 数, 研究润湿性对疏水表面流体流动特性的影响.



图1 不同吸附参数下液滴的形态及接触角值





图 3 通道的流体平均速度图

图3,图4分别是具有不同润湿性表面通道的

流体平均速度图和y方向速度分布图,其中疏水表 面对应的接触角分别为108.9°,120.5°,132.7°.当 流动稳定后,相对于无滑移表面通道,三种疏水表 面通道的流体平均速度均增大,增幅分别为3.24%, 4.75%,7.42%,而且接触角越大(即疏水性越强), 通道的流体平均速度越大.从通道y方向的速度 分布图可以看出,疏水表面贴近壁面处(y = 0和 y = 200)的流体速度为0,仍然满足无滑移边界条 件,但就整体而言,疏水表面的流体速度分布曲线 出现上移现象,而且接触角越大,曲线上移越明显.



图4 通道 y 方向的速度分布图

为了探索润湿性对疏水表面流体流动的影响 机制,图5给出了通道*y*方向的密度分布.从图中 可以看出,由于疏水性作用,疏水表面通道的密度 分布不再均匀,在近壁区产生了一个低密度层,而 且低密度层是在没有任何先验假设的情况下自然 出现的. 正是这个低密度层导致了疏水表面近壁 区的流体速度显著增大. 从微观角度看, 由于数值 模拟中壁面采用了无滑移反弹格式,疏水表面壁面 处的流体速度仍然为零,但近壁区存在一个奇异层 (即低密度层),在奇异层内速度从壁面处的零以较 大的速度梯度增加. 由于奇异层的厚度极小. 就仿 佛在壁面处发生了滑移一样,即所谓的"表现滑移" (如图6). 滑移长度b可理解为固体壁面以下到当 流体速度分布曲线向外扩展出实际流场区域至满 足无滑移边界条件时的局部等价距离, 而滑移速度 us则为流体速度分布曲线向外扩展至壁面处的速 度值.



根据滑移长度和滑移速度的定义,对疏水表面 流场低密度层以外的速度值进行二次项拟合,并将 拟合曲线向实际流场区域外扩展(如图7), u = 0

0.16 r

0.12

a 0.08

0.04

0

时拟合曲线对应的坐标值与壁面处的坐标值之间 的距离即为滑移长度, $m_y = 0$ 时拟合曲线对应的 速度值即为滑移速度. 表1给出了不同吸附参数时 疏水表面的滑移长度和滑移速度值,吸附参数的绝 对值越小,即疏水性越强,滑移长度越大,滑移速度 也越大. 对滑移长度和吸附参数进行拟合(如图8), 可以发现两者之间存在近似的指数函数关系,函数 表达式为

$$b = \exp(1.6208 \times G_{\rm s} + 3.2750). \tag{17}$$

此外,本文以三种不同接触角108.9°,120.5°, 132.7°(即 $G_s = -2.4, -2.0, -1.6$)的疏水表面为 例,考察了滑移长度、滑移速度与外部流场压力梯 度的关系,如图9,图10所示.从图中可以看出,滑 移长度不随压力梯度的改变而改变, 而滑移速度与 压力梯度呈线性关系,滑移速度随压力梯度的增大 而增大.



图 7 滑移长度和滑移速度的计算

054701 - 5

|--|

$ G_{\rm s} $	-2.8	-2.6	-2.4	-2.2	-2.0	-1.8	-1.6	-1.4	-1.2
滑移长度	0.2559	0.3980	0.5720	0.7890	1.0671	1.4338	1.9358	2.6541	3.7345
滑移速度	0.0008	0.0012	0.0017	0.0024	0.0032	0.0043	0.0059	0.0081	0.0114



图 10 滑移速度与压力梯度的关系

综合分析图8至图10可以得出,流体在疏水表 面的流动存在表观滑移现象,滑移长度仅和壁面、 流体的性质相关,而与流动本身的性质无关.当流体的性质确定时,滑移长度是疏水表面的固有属性,其值可以根据(17)式由吸附参数(即固体壁面 对流体的作用强度)估算出来,而滑移长度与减阻 效果之间存在一一对应关系,进而能够非常方便地 评估出润湿性对疏水表面减阻作用的贡献.

4 结 论

本文利用格子 Boltzmann 方法对疏水表面的 流体流动进行数值模拟,分析了润湿性对疏水表面 滑移流动及减阻特性的影响,获得如下结论:

 流体在疏水表面的流动存在表观滑移现象, 其疏水性作用在近壁区诱导了一个低密度层,而表 观滑移则发生在低密度层上.

 表观滑移是疏水表面具有减阻作用的直接 原因,而减阻效果可以直接用滑移长度来表征,滑 移长度越大,减阻效果越明显.

 滑移长度不随压力梯度的改变而改变,仅 是壁面润湿性的单一函数,即滑移长度是疏水表面 的固有属性;而滑移速度与压力梯度呈线性关系, 滑移速度随压力梯度的增大而增大.

感谢九州大学应用力学研究所胡长洪教授给予的有益 指导和讨论.

参考文献

- Xu C, He Y L, Wang Y 2005 Journal of Engineering Thermophysics 26 912 (in Chinese)[徐超,何雅玲,王勇 2005 工程热物理学报 26 912]
- [2] 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]
- [3] Chang-Hwan Choi, Westin K A, Breuer K S 2003 *Physics of Fluids* 15 2897
- [4] Zhang J F, Daniel Y Kwok 2004 Phys. Rev. E 70 056701
- [5] SalilGogte, PeterVorobieff, Richard Truesdell 2005 *Physics of Fluids* 17 051701
- [6] David M Huang, Christian Sendner, Dominik Horinek 2008 Phys. Rev. Lett. 101 226101

- [7] Cao B Y, Sun J, Chen M 2009 International Journal of Molecular Sciences 10 4638
- [8] Cao B Y, Chen M, Guo Z Y 2006 Phys. Rev. E 74 066311
- [9] NishanthDongari 2011 Chemical Engineering and Processing: Process Intensification 50 450
- [10] Toru Yamada, Chungpyo Hong, Otto J Gregory 2011 MicrofluidNanofluid 11 45
- [11] Huang H B, Lee T S, Shu C 2007 International Journal of NumericalMethods for Heat & Fluid Flow 17 587
- [12] Zeng J B, Li L J, Liao Q 2010 Acta Phys. Sin. 59 178
 (in Chinese)[曾建邦, 李隆键, 廖全 2010 物理学报 59 178]

- [13] 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]
- [14] J Harting, C Kunert, H J Herrmann 2006 Europhys. Lett. 75 328
- [15] Chen Y Y, Yi H H, Li H B 2008 Chin. Phys. Lett. 25 184
- [16] Zhang R L, Di Q F, Wang X L 2012 Journal of Hydrodunamics 24 535
- [17] P L Bhatnagar, E P Gross, M Krook 1954 *Phys. Rev.* 94 511
- [18] Shan X W, Chen H D 1993 Phys. Rev. E 47 1815
- [19] Shan X W, Chen H D 1994 Phys. Rev. E 49 2941
- [20] Shan X W, Chen H D 1994 Phys. Rev. E 49 2941

Lattice Boltzmann simulation of slip flow and drag reduction characteristics of hydrophobic surfaces^{*}

Huang Qiao-Gao¹⁾²⁾ Pan Guang^{1)†} Song Bao-Wei¹⁾

1) (School of Marine Science and Technology, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

2) (Research Institute for Applied Mechanics, Kyushu University, Fukuoka 816-8580, Japan)

(Received 18 October 2013; revised manuscript received 12 November 2013)

Abstract

The relationship between the surface wettability and the interaction strength of liquid-wall particles is first investigated using a lattice Boltzmann method, and then the liquid flow over hydrophobic surfaces is simulated in a microchannel. Effect of surface wettability on the slip flow and drag reduction characteristics of hydrophobic surfaces is obtained. Existence of the apparent slip on hydrophobic surfaces is confirmed and its mechanism is revealed. Simulation results show that the hydrophobicity induces a low density layer near the wall of hydrophobic surfaces and the apparent slip is observed on the low density layer. It is shown that the apparent slip is a direct cause of hydrophobic surfaces' drag reduction effect. Thus the drag reduction effect increases with increasing slip length. For a specific fluid system, the slip length is an inherent property of the hydrophobic surfaces and is a single function of the surface wettability. The slip length does not change with the external flow property.

Keywords: hydrophobic surface, slip flow, drag reduction mechanism, lattice Boltzmann methodPACS: 47.11.Qr, 02.60.Cb, 47.85.DhDOI: 10.7498/aps.63.054701

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 51279165, 51109178).

[†] Corresponding author. E-mail: panguang601@163.com