

# 两球形颗粒间横向毛细力的 格子 Boltzmann 研究\*

梁功有<sup>1</sup>, 曾 忠<sup>1,2</sup>, 张永祥<sup>1</sup>,  
张良奇<sup>1</sup>, 谢海琼<sup>1</sup>, 陈 昱<sup>3</sup>

1. 重庆大学 资源及环境科学学院 工程力学系, 重庆 400044;
2. 重庆大学 煤矿灾害动力学与控制国家重点实验室, 重庆 400044;
3. 东京大学 新领域创成科学研究科人间环境学专攻, 东京 1138656)

**摘要:** 采用以 Shan-Chen 多组分模型为基础的格子 Boltzmann-伪固体模型对两颗粒间的浮体和浸润横向毛细力展开数值模拟研究, 其中流体-固体间的相互作用及颗粒润湿性质在介观层次上采用简单形式得以充分考虑. 三维测试表明, 与已有理论解相比, 成功再现了横向毛细力与颗粒间距的“ $1/L$ ”关系, 并确认了浸润横向毛细力与表面张力间的线性关系. 这表明可进一步应用该模型研究横向毛细力作用下的颗粒自聚集等现象.

**关键词:** 格子 Boltzmann 方法; 固-液两相流; 横向毛细力; 流体动力学相互作用

**中图分类号:** O357.1      **文献标志码:** A

**DOI:** 10.3879/j.issn.1000-0887.2013.05.002

## 引 言

毛细力作用下颗粒自聚集形成的结构在实验和实际中有重要的应用<sup>[1]</sup>, 从而吸引了大批学者进行研究<sup>[2-4]</sup>. 自聚集现象可以发生在各个尺度上, 已有研究表明<sup>[5-6]</sup>, 当粒子的尺度在微米级以上时, Brown 力、静电力或 van der Waals 力均不起主导作用, 相反, 除了水动力学相互作用力外, 粒子间相互吸引的横向毛细力将起主导作用. 因此, 研究横向毛细力对研究自聚集过程有着重要意义. Kralchevsky 和 Nagayama<sup>[5]</sup> 在液面变形不是很大假设下求解关于毛细现象的 Laplace 方程, 在理论上给出两静止粒子间的浮体和浸润横向毛细力. Dushkin 等<sup>[7]</sup> 通过测量两直径为 600  $\mu\text{m}$  玻璃球间的横向毛细力, 证实了该理论解的正确性. 最近 Leonardo 等<sup>[8]</sup>, 采用静态、无侵入手段测量了液膜内微米级大小粒子间的横向毛细力, 确认该理论解中, 当颗粒间距远小于毛细长度, 而大于两颗粒上三相线的接触线半径时, 横向毛细力与颗粒间距  $L$  的倒数关系.

数值模拟是研究横向毛细力和自聚集现象的重要手段. 模型需要能够捕捉流体界面现象、

\* 收稿日期: 2013-03-25; 修订日期: 2013-04-07

**基金项目:** 国家自然科学基金资助项目(10872222;50921063); 高等学校博士学科点专项科研基金资助项目(20110191110037)

**作者简介:** 梁功有(1983—), 男, 河南人, 博士生(E-mail: gyliang2003@gmail.com);  
曾忠(1968—), 教授, 博士生导师(通讯作者. E-mail: zzheng@cqu.edu.cn).

动态接触线,以及考虑流体-固体间的相互作用. Nishikawa 等<sup>[9]</sup>以离散元法为基础建立二维模型模拟了胶体颗粒的自聚集过程. Rabideau 等<sup>[10]</sup>以二维 Monte Carlo 方法为基础建立模型考虑蒸发作用下的胶体颗粒自聚集现象. 在他们的模型中,横向毛细力是一静态理论近似结果,且难于考虑各个尺度上物体间的横向毛细力.

格子 Boltzmann 方法(lattice Boltzmann method, LBM)以其程序设计简单,天然的并行性,易于处理任何复杂边界及介观特性容易考虑粒子间的微观作用,在颗粒悬浮流,多相多组分流等领域取得了重要成就<sup>[11-13]</sup>. Ladd 和 Aidun 等<sup>[14-15]</sup>首先利用 LBM 对颗粒悬浮流进行了研究. 近年来,一些学者将 Ladd 的方法和格子 Boltzmann 多相多组分模型结合起来,可以模拟复杂的流-固耦合现象<sup>[16-17]</sup>等. Shinto 等<sup>[18]</sup>则将 Ladd 的模型与格子 Boltzmann 中的自由能模型结合起来,研究了二维情况下两圆柱和方柱间的横向毛细力,但三维情况下两球间横向毛细力还未研究与分析. 在流体颗粒动力学模型(fluid particle dynamics, FPD)中<sup>[19]</sup>,悬浮在流体中的颗粒被处理为具有高粘性,不可变形的流体颗粒. 这样在充分考虑流体动力学相互作用时,无需处理无滑移边界条件. Onishi 等<sup>[20]</sup>首先在二维 Shan-Chen(SC)两组分格子 Boltzmann 模型<sup>[21]</sup>基础上实现了 FPD,最近 Liang 等<sup>[22]</sup>将该模型进行了完善并推广到三维,且命名为格子 Boltzmann-伪固体模型(lattice Boltzmann pseudo-solid model, LB-PSM). 这里使用三维 LB-PSM 研究两球间的横向毛细力.

## 1 D3Q19 格子 Boltzmann-伪固体模型

### 1.1 SC 两组分格子 Boltzmann 模型

在 SC 模型中,每种组分的状态通过微观粒子的离散速度分布函数  $n_i^\sigma(\mathbf{x}, t)$  来描述.  $n_i^\sigma(\mathbf{x}, t)$  表示  $t$  时  $\sigma$  组分在  $\mathbf{x}$  处的分布函数. 这里用  $\sigma = R, B$  来标识红蓝两种流体. 在单位格子长度和时间步长下,  $n_i^\sigma(\mathbf{x}, t)$  的演化方程为<sup>[21,23]</sup>

$$n_i^\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i, t + 1) - n_i^\sigma(\mathbf{x}, t) = -\frac{n_i^\sigma(\mathbf{x}, t) - n_i^{\sigma, \text{eq}}(\mathbf{x}, t)}{\tau_\sigma} + F_i^\sigma. \quad (1)$$

在式(1)中,左边代表粒子的迁移过程,右边第 1 项代表单松弛类型的松弛过程,粒子在时间  $\tau_\sigma$  内将松弛到局部平衡态分布函数  $n_i^{\sigma, \text{eq}}$ .  $F_i^\sigma$  用以考虑作用于  $\sigma$  组分上的外力  $\mathbf{f}_\sigma$  的影响. 每种组分的质量密度  $\rho_\sigma$  和速度  $\mathbf{u}_\sigma$  为

$$\rho_\sigma = m_\sigma n_\sigma = m_\sigma \sum_i n_i^\sigma, \quad \rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma = m_\sigma \sum_i n_i^\sigma \mathbf{e}_i, \quad (2)$$

其中,  $m_\sigma$  是一个微粒子的质量,  $n_\sigma$  是  $\sigma$  组分的数密度. D3Q19 模型中,  $n_i^{\sigma, \text{eq}}$  为

$$n_i^{\sigma, \text{eq}} = \omega_i n_\sigma \left( 1 + 3(\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{v}}_f) + \frac{9}{2}(\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{v}}_f)^2 - \frac{3}{2}|\tilde{\mathbf{v}}_f|^2 + \frac{3}{2}\left(\frac{1}{m_\sigma} - 1\right)(|\mathbf{e}_i|^2 - 1) \right), \quad (3)$$

其中,权系数  $\omega_0 = 1/3$ ;  $\omega_i = 1/18, i = 1, 2, \dots, 6$ ;  $\omega_i = 1/36, i = 7, 8, \dots, 18$ ;  $\mathbf{e}_i$  为离散速度. 共同速度  $\tilde{\mathbf{v}}_f$  为各组分速度的质量加权平均:

$$\tilde{\mathbf{v}}_f = \sum_\sigma \left( \frac{m_\sigma n_\sigma \mathbf{u}_\sigma}{\tau_\sigma} \right) / \sum_\sigma \left( \frac{m_\sigma n_\sigma}{\tau_\sigma} \right). \quad (4)$$

同时,引入了组分  $\sigma$  和  $\bar{\sigma}$  粒子间的远程流体-流体相互作用力

$$\mathbf{f}_\sigma = \sum_{\bar{\sigma}} \mathbf{f}_{\sigma\bar{\sigma}} = -\psi_\sigma(\mathbf{x}) \sum_{\bar{\sigma}} \sum_i \omega_i G_{\sigma\bar{\sigma}} \psi_{\bar{\sigma}}(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i. \quad (5)$$

这里势函数  $\psi_\sigma = n_\sigma$ , 通过设定正或负的  $G_{\sigma\bar{\sigma}}$  值可实现组分微粒子间的相互排斥或吸引. 给定  $G_{\sigma\bar{\sigma}}$  后可利用 Laplace 定理测出流体表面张力. 为保证二阶精度, 式(1)中  $F_i^\sigma$  为<sup>[23-24]</sup>

$$F_i^\sigma = 3\omega_i(\mathbf{e}_i - \tilde{\mathbf{v}}_f + 3\mathbf{e}_i\mathbf{e}_i \cdot \tilde{\mathbf{v}}_f) \cdot \mathbf{f}_\sigma / m_\sigma. \quad (6)$$

## 1.2 格子 Boltzmann-伪固体模型

LB-PSM 基本思想如下<sup>[20,22]</sup>: 将悬浮颗粒处理为一个伪固体颗粒, 即它同时具有固体和流体性质. 在伪固体颗粒的演化过程中, 存在相互交替的运动和相互作用两个阶段. 在运动阶段, 它是一个刚体; 在相互作用阶段, 保持不变形情况下将瞬间溶解到流体中. 溶解后的流体颗粒如同另外一种流体组分与周围流体相互作用.

假设溶解后的伪固体颗粒也由许多固体微粒子组成, 且这些固体微粒子也在流体粒子所在的格点上. 流体粒子可以在任意格点上存在, 包括固体颗粒内部, 这与 Ladd 的颗粒模型类似. 固体微粒子和流体粒子的共同格点在图 1 中显示, 并用灰色标度表示其数密度  $n_s(\mathbf{x})$  的大小. 对半径为  $R$  的球型胶体颗粒, 假定  $n_s(\mathbf{x})$  为到几何中心  $\mathbf{X}_C$  距离的函数:

$$n_s(\mathbf{x}) = \begin{cases} 1.0, & r < R - 0.5\xi, \\ 0.0, & r > R + 0.5\xi, \\ 1.0 - (r - R + 0.5\xi)/\xi, & R - 0.5\xi \leq r \leq R + 0.5\xi, \end{cases} \quad (7)$$

这里  $\xi$  用来刻画流-固界面的厚度, 本文设定  $\xi = 1.0$ .  $r = |\mathbf{x} - \mathbf{X}_C|$  为相对距离. 固体微粒子的局部质量密度为  $\rho_s(\mathbf{x}) = m_s n_s(\mathbf{x})$ , 其中  $m_s$  是一个固体微粒子的质量. 固体颗粒总质量近似为  $M = 4\pi R^3 m_s / 3$ . 在运动过程中, 固体微粒子不能自由运动. 且在  $\mathbf{x}$  处的速度是平动速度  $\mathbf{V}_T$  与旋转速度  $\mathbf{V}_R = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r}$  ( $\boldsymbol{\Omega}$  是固体颗粒的旋转角速度) 之和:

$$\mathbf{V}_s(\mathbf{x}) = \mathbf{V}_T + \mathbf{V}_R. \quad (8)$$

当运动阶段结束时, 固体颗粒的几何中心、平动速度和旋转角速度通过如下方程进行迭代求解:

$$\frac{d\mathbf{X}_C}{dt} = \mathbf{V}_T, \quad \frac{M d\mathbf{V}_T}{dt} = \mathbf{F}, \quad \frac{I d\boldsymbol{\Omega}}{dt} = \mathbf{T}. \quad (9)$$

转动惯量为  $I = MR^2/2$ ,  $\mathbf{F}$  和  $\mathbf{T}$  是施加在其上的总力和力矩:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^G + \mathbf{F}^H + \mathbf{F}^C, \quad \mathbf{T} = \mathbf{T}^H + \mathbf{T}^C, \quad (10)$$

其中,  $\mathbf{F}^G$  代表重力,  $\mathbf{F}^H$  和  $\mathbf{T}^H$  分别是水动力和相应的力矩,  $\mathbf{F}^C$  和  $\mathbf{T}^C$  分别是毛细力和对应的力矩.

在相互作用阶段, 固体微粒子与流体粒子相互作用, 式(4)中的共同速度需修正为

$$\tilde{\mathbf{v}} = \left( \frac{m_s n_s \mathbf{V}_s}{\tau_s} + \sum_\sigma \frac{m_\sigma n_\sigma \mathbf{u}_\sigma}{\tau_\sigma} \right) / \left( \frac{m_s n_s}{\tau_s} + \sum_\sigma \frac{m_\sigma n_\sigma}{\tau_\sigma} \right). \quad (11)$$

方程(1)乘以  $\mathbf{e}_i$  和  $m_\sigma$ , 并对所有离散速度方向进行求和, 可以得到每种组分在相互作用时的动量变化量:

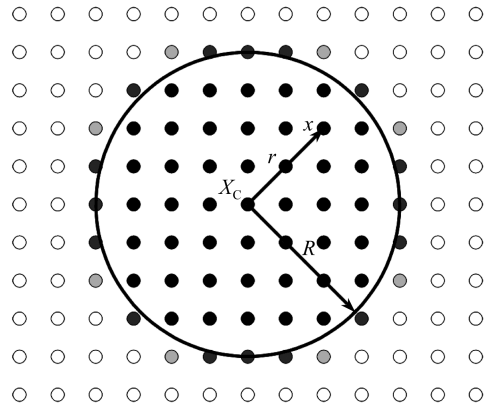


图 1 流体中球形伪固体模型示意图

Fig. 1 A schematic representation of the pseudo-solid model for a spherical colloidal particle suspended in a solvent fluid

$$\frac{\delta(\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma(\mathbf{x}, t))}{\delta t} = -\frac{\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma(\mathbf{x}, t) - \rho_\sigma \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)}{\tau_\sigma} + \mathbf{f}_\sigma^{\text{total}}. \quad (12)$$

这里总的外力包括流体-流体间和固体-流体间的相互作用力:

$$\mathbf{f}_\sigma^{\text{total}} = \sum_{\bar{\sigma}} \mathbf{f}_{\sigma\bar{\sigma}} + \mathbf{f}_{\sigma S}. \quad (13)$$

固体微粒子的动量变化量也有同样的松弛形式:

$$\frac{\delta(\rho_S \mathbf{V}_S(\mathbf{x}, t))}{\delta t} = -\frac{\rho_S \mathbf{V}_S(\mathbf{x}, t) - \rho_S \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)}{\tau_S} + \mathbf{f}_S^{\text{total}}. \quad (14)$$

可以证明方程(14)所定义的共同速度能够保证流体组分的动量变化量  $\Delta \mathbf{P}^F(\mathbf{x})$  与固体微粒子的动量变化量  $\Delta \mathbf{P}^S(\mathbf{x})$  大小相同,符号相反<sup>[23]</sup>:

$$\begin{aligned} \Delta \mathbf{P}^F(\mathbf{x}) &= -\sum_{\sigma} \frac{\rho_\sigma \mathbf{u}_\sigma(\mathbf{x}, t) - \rho_\sigma \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)}{\tau_\sigma} = \\ &= \frac{\rho_S \mathbf{V}_S(\mathbf{x}, t) - \rho_S \tilde{\mathbf{v}}(\mathbf{x}, t)}{\tau_S} = -\Delta \mathbf{P}^S(\mathbf{x}). \end{aligned} \quad (15)$$

因此,当不考虑微粒子间的相互作用  $\mathbf{f}_\sigma^{\text{total}}$  和  $\mathbf{f}_S^{\text{total}}$  时局部动量可以守恒,反之在全局上守恒. 假定伪固体颗粒始终处于热力学平衡状态下,从而设定松弛时间  $\tau_S = 1.0$ . 流体-固体微粒子间远程相互作用力  $\mathbf{f}_S^{\text{total}}$  也采用 SC 模型中流体-流体粒子间相互作用力的形式:

$$\mathbf{f}_S^{\text{total}}(\mathbf{x}) = \sum_{\sigma} \mathbf{f}_{S\sigma} = -\psi_S(\mathbf{x}) \sum_{\sigma} \sum_i \omega_i G_{S\sigma} \psi_\sigma(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i. \quad (16a)$$

相应的,施加在流体组分  $\sigma$  上的作用力为

$$\mathbf{f}_{\sigma S}(\mathbf{x}) = -\psi_\sigma(\mathbf{x}) \sum_i \omega_i G_{\sigma S} \psi_S(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i) \mathbf{e}_i. \quad (16b)$$

固体颗粒的润湿性质,也就是对  $\sigma$  组分的亲水性还是疏水性,可通过设定负或正的  $G_{\sigma S}$  来控制. 在相互作用阶段最后,固体微粒子重新凝结为一个刚体颗粒,从而  $\mathbf{F}^C, \mathbf{T}^C, \mathbf{F}^H$  和  $\mathbf{T}^H$  可在  $n_S(\mathbf{x}) \neq 0$  的区域上求和得到:

$$\mathbf{F}^C = \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{f}_S^{\text{total}}(\mathbf{x}), \quad \mathbf{T}^C = \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{r} \times \mathbf{f}_S^{\text{total}}(\mathbf{x}), \quad (17a)$$

$$\mathbf{F}^H = \sum_{\mathbf{x}} \Delta \mathbf{P}^S(\mathbf{x}), \quad \mathbf{T}^H = \sum_{\mathbf{x}} \mathbf{r} \times \Delta \mathbf{P}^S(\mathbf{x}). \quad (17b)$$

已经考虑多个算例证明了 LB-PSM 的正确可靠性,可以用来模拟流体界面现象和流-固相互作用<sup>[22]</sup>.

## 2 横向毛细力的研究

### 2.1 横向毛细力的理论公式

如图2(a)和(b)所示,颗粒周围液面在重力或壁面作用形成弯月面. 当周围存在其它颗粒时,弯月面发生形变,其水平方向不平衡的表面张力即为横向毛细力. 在液面变形不是很大时,通过求解关于毛细现象的 Laplace 方程,并利用叠加原理,可得处于流体界面上两颗粒间的横向毛细力  $F$ <sup>[5]</sup>:

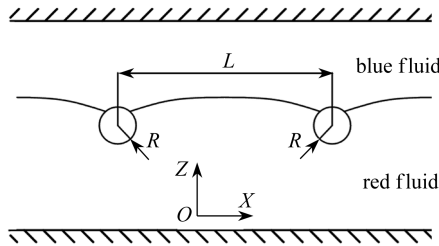
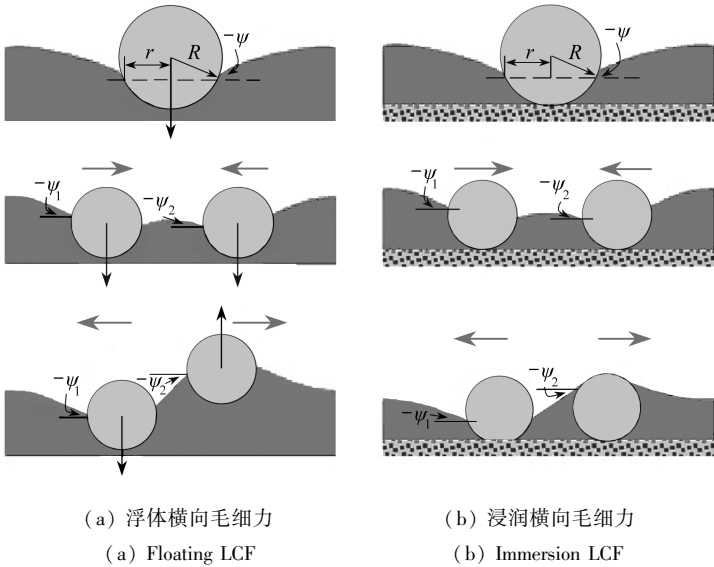
$$F \approx -2\pi\gamma Q_1 Q_2 q K_1(qL), \quad r_i \ll L, \quad i = 1, 2. \quad (18)$$

方程(18)中,  $Q_i = r_i \sin(\psi_i)$ ,  $i = 1, 2$  是毛细管电荷,且几乎不随两颗粒间距  $L$  而变化.  $Q_i$  用来刻画弯月面偏离三相线平面的程度,  $r_i$  和  $\psi_i$  是两颗粒上三相线的接触线半径和倾斜角. 毛细管长度  $q^{-1} = \sqrt{(\rho_R - \rho_B)g/\gamma + \Pi/\gamma}$ , 其中  $\Pi$  是关于液膜厚度而产生的分离压 (disjoining pressure), 当液膜足够厚时,  $\Pi/\gamma$  可忽略不计;  $K_1$  是一阶修正 Bessel 函数. 此外  $r_i \leq L \ll q^{-1}$  条件

下,方程(18)进一步简化为

$$F \approx -2\pi\gamma Q_1 Q_2 / L, \quad r_i \ll L \ll q^{-1}, \quad i = 1, 2. \quad (19)$$

式(19)意味着在给定表面张力下,  $F$  与颗粒间距  $L$  成反比, 这就是两颗粒间横向毛细力的“ $1/L$ ”公式.



(c) 测试几何示意图

(c) Geometry configuration for measuring the LCFs

图2 两颗粒间横向毛细力及测试时的几何示意图

Fig.2 LCFs between two particles and geometry configuration for measuring them

## 2.2 浮体横向毛细力的模拟研究

首先对漂浮在流体界面上两颗粒间的横向毛细力进行测试. 考虑到常用的聚苯乙烯颗粒有  $85^\circ$  左右的接触角, 简单起见, 设定  $G_{RS} = G_{BS} = 1.2$  以形成  $90^\circ$  接触角(中性润湿). 如图 2(c) 所示, 沿  $X, Y$  和  $Z$  方向的格子数为  $240 \times 80 \times 80$ .  $Z$  方向上下为静止壁面,  $X$  方向和  $Y$  方向为周期边界. 颗粒中心间距为  $L$ , 半径均为  $R$ . 测试过程中颗粒的  $X$  和  $Z$  向位置固定不动. 上半部为蓝流体, 下半部为红流体, 且高度为 40 格子.  $m_R = m_B = 1.0, m_S = 1.1$ . 设定  $G_{RB} = 1.8$  (表面张力  $\gamma_{RB} = 0.072$ ). 达到稳定状态的  $F_X^H + F_X^C$  即为横向毛细力  $F$ . 以连续 1 000 步内  $F_X^H + F_X^C$  的相对变化小于 0.005% 为收敛判据, 一般需要 4 万到 5 万个时间步. 程序采用 OpenMP 进行并行, 在 Xeon X5690 CPU 上以六线程进行计算, 性能在 5 ~ 6 MLUPS (每秒所能迭代的百万格子数).

由于红蓝流体密度相等, 毛细管长度  $q^{-1}$  为无穷大, 因此在小颗粒半径下可以确保满足条

件  $r_i \ll L \ll q^{-1}$ . 这里设定  $R=6, L/R$  从 3 到 14. 在理论公式(18)中,使用了流体界面变形不是很大的前提假设,因此这里设定 Bond ( $\Delta\rho g R^2/\gamma_{RB}$ ,重力与表面张力之比)数为 0.3. 在图 3 中,实心圆点是  $F$  随  $L/R$  变化的测试结果,直线则为对应的双对数坐标系下的线性拟合,且斜率为  $-1.02$ . 直线拟合中,决定系数 adjusted  $R$ -square 为 0.981 4,因此,所测结果呈很强的线性,证实了式(19)中的“ $1/L$ ”公式,且这一结果在使用 LBM 中迄今还未见报道. 进一步设定 Bond 数为 0.4,所测结果和对应的线性拟合如图 3 中的空心圆点和虚线所示. 此时液面变形较大,所得虚线斜率为  $-1.16$ ,偏离  $-1.0$  很大. 因此,在以离散元法或 Monte Carlo 方法为基础的模式<sup>[9-10]</sup>中,使用的近似理论难以正确考虑大变形时颗粒间的横向毛细力.

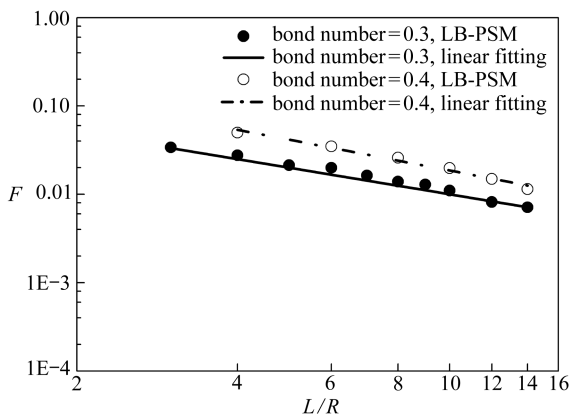


图 3 两颗颗粒间浮体横向毛细力与颗粒间距关系

Fig. 3 The relationship between LCFs and normalized interparticle distance

## 2.3 浸润横向毛细力的模拟研究

### 2.3.1 “ $1/L$ ”定理的验证

在目前的格子 Boltzmann 模型中难以确定分离压. 为不考虑颗粒-基板间的相互作用,这里采用 Dushkin 等<sup>[7]</sup>在实验中使用的方法. 类似于图 2(c)中测试浮体横向毛细力时的方法,一对胶体颗粒处于红蓝流体界面上,且  $Z$  向和  $X$  向位置固定. 初始时,当颗粒均不亲红流体和蓝流体时,流体界面的高度高于几何中心线  $R/2$ ;当颗粒仅亲红流体时,则低于  $R/3$ .

模拟中使用  $200 \times 100 \times 100$  的格子,颗粒半径  $R$  也均为 6,从而颗粒中心位置为  $(100 \pm L/2, 50, 47)$  (同时疏红、蓝流体) 或  $(100 \pm L/2, 50, 52)$  (仅亲红流体). 为消除周围颗粒的影响,所有边界均设置为静止壁面. 流体的物理参数设置为  $m_R = 1.05, m_B = 1.0, \tau_R = \tau_B = 1.0, G_{RB} = 1.5$ . 重力忽略不计,  $m_S = 1.1$ . 对于中性润湿颗粒,  $G_{RS} = G_{BS} = 1.2$ ; 对于完全润湿颗粒,  $G_{RS} = -0.05$ . 同样通过测试达到稳定状态的  $F_X^H + F_X^C$  得到横向毛细力.

图 4 是浸润横向毛细力与颗粒间距的双对数关系,其中圆点为测试结果,线条为  $c/L, c$  为常值. 由于不考虑重力作用,毛细管长度同样均为无限长,从而确保了小颗粒半径下“ $1/L$ ”定律的适用条件. 图 4 再现了浸润横向毛细力的“ $1/L$ ”定律,尽管稍有误差.

### 2.3.2 表面张力与横向毛细力关系的验证

进一步固定颗粒间距以研究横向毛细力  $F$  与表面张力  $\gamma_{RB}$  的关系. 通过调整  $G_{RB}$  可实现不同的表面张力. 图 5 为  $L/R = 4$  时  $F$  与  $\gamma_{RB}$  的关系,其中颗粒均疏红蓝流体,圆点为测试结果,实线为线性拟合. 根据式(19)可知,  $F$  与  $\gamma_{RB}$  成正比,而图 5 中线性拟合时的 adjusted  $R$ -square 为 0.988,因此可认为 LB-PSM 模拟结果中的线性关系成立.

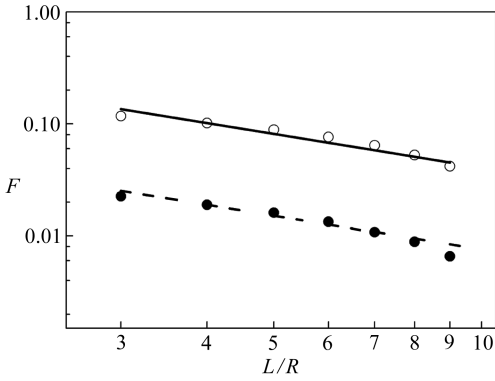


图4 浸润横向毛细力与颗粒间距关系(实心、空心圆点分别为颗粒疏、亲红蓝流体时的测试结果,虚线和实线为对应的“ $1/L$ ”拟合函数)

Fig.4 Relationship between immersion LCF and normalized interparticle distance ((●: particles are equally hydrophobic to both the red and blue fluid; ○: hydrophilic to the red fluid) are simulation results while the solid and dashed lines exhibit the “ $1/L$  Law”)

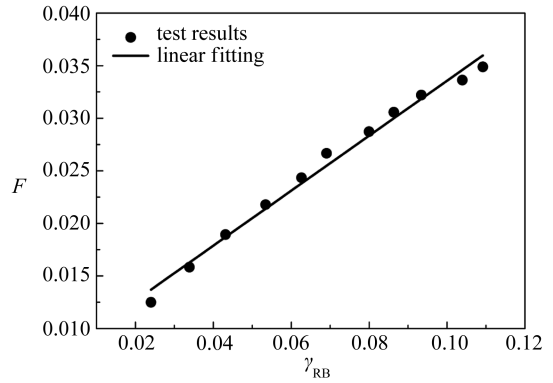


图5 两颗粒(均疏红蓝流体)间横向毛细力与流体表面张力  $\gamma_{RB}$  的关系(其中颗粒间距固定为  $4R$ )

Fig.5 Relationship between fluid interfacial tension  $\gamma_{RB}$  and LCF between two hydrophobic particles (the center-to-center distance is fixed as  $4R$ )

### 3 结 论

三维 LB-PSM 模拟为研究横向毛细力现象提供了一个重要可选择手段. 在本论文的研究中, 关于浮体和浸润横向毛细力的“ $1/L$ ”定理, 以及浸润横向毛细力与表面张力间的线性关系得到验证. 这表明 LB-PSM 中通过引入流-固微粒子间的相互作用这一简单形式, 可以正确考虑流体-固体间相互作用, 并再次证明 LBM 的基本思想, 即, 构造简化的动力学模型, 通过引入粒子间微观或介观层次上的物理作用, 可以正确描述流体运动的宏观规律<sup>[11-12]</sup>.

在实际多颗粒系统中, 施加在一个颗粒上的有效横向毛细力是多体相互作用的结果, 另外颗粒形状对横向毛细力的影响也很大. 因此, 将进一步对多体效应、非球形颗粒间的横向毛细力, 以及胶体颗粒自聚集过程展开研究.

#### 参考文献 (References):

- [1] Grzelczak M, Vermant J, Furst E M, Liz-Marzán L M. Directed self-assembly of nanoparticles [J]. *ACS Nano*, 2010, **4**(7): 3591-3605.
- [2] Kralchevsky P A, Denkov N D. Capillary forces and structuring in layers of colloid particles [J]. *Curr Opin Colloid Interface Sci*, 2001, **6**(4): 383-401.
- [3] Madivala B, Vandebriel S, Franssaer J, Vermant J. Exploiting particle shape in solid stabilized emulsions[J]. *Soft Matter*, 2009, **5**(8): 1717-1727.
- [4] Furst E M. Directing colloidal assembly at fluid interfaces[J]. *PNAS*, 2011, **108**(52): 20853-20854.
- [5] Kralchevsky P A, Nagayama K. Capillary forces between colloidal particles[J]. *Langmuir*, 1994, **10**(1): 23-36.
- [6] Li Q, Jonas U, Zhao X S, Kappl M. The forces at work in colloidal self-assembly: a review on fundamental interactions between colloidal particles[J]. *Asia-Pac J Chem Eng*, 2008, **3**

- (3): 255-268.
- [7] Dushkin C D, Kralchevsky P A, Yoshimura H, Nagayama K. Lateral capillary forces measured by torsion microbalance[J]. *Phys Rev Lett*, 1995, **75**(19): 3454-3457.
- [8] Leonardo R Di, Saglimbeni F, Ruocco G. Very-long-range nature of capillary interactions in liquid films[J]. *Phys Rev Lett*, 2008, **100**(10): 106103(1-3).
- [9] Nishikawa H, Maenosono S, Yamaguchi Y, Okubo T. Self-assembling process of colloidal particles into two-dimensional arrays induced by capillary immersion force: a simulation study with discrete element method[J]. *J Nanopart Res*, 2003, **5**(1): 103-110.
- [10] Rabideau B D, Pell L E, Bonnecaze R T, Korgel B A. Observation of long-range orientational order in monolayers of polydisperse colloids[J]. *Langmuir*, 2007, **23**(3): 1270-1274.
- [11] Benzi R, Succi S, Vergassola M. The lattice Boltzmann equation: theory and applications[J]. *Phys Rep*, 1992, **222**(3): 145-197.
- [12] Chen S, Doolen G. Lattice Boltzmann method for fluid flows[J]. *Annu Rev Fluid Mech*, 1998, **30**(1): 329-364.
- [13] 郭照立, 郑楚光. 格子 Boltzmann 方法的原理及应用[M]. 北京: 科学出版社, 2009. (GUO Zhao-li, ZHENG Chu-guang. *Theory and Applications of Lattice Boltzmann Method* [M]. Beijing: Science Press, 2009. (in Chinese))
- [14] Ladd A J C. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation—part 1: theoretical foundation[J]. *J Fluid Mech*, 1994, **271**: 285-309.
- [15] Aidun C, Lu Y. Lattice Boltzmann simulation of solid particles suspended in fluid[J]. *J Stat Phys*, 1995, **81**(1): 49-61.
- [16] Stratford K, Adhikari R, Pagonabarraga I, Desplat J. Lattice Boltzmann for binary fluids with suspended colloids[J]. *J Stat Phys*, 2005, **121**(1): 163-178.
- [17] Jansen F, Harting J. From bijels to pickering emulsions: a lattice Boltzmann study[J]. *Phys Rev E*, 2011, **83**(4): 046707(1-11).
- [18] Shinto H, Komiyama D, Higashitani K. Lateral capillary forces between solid bodies on liquid surface: a lattice Boltzmann study[J]. *Langmuir*, 2006, **22**(5): 2058-2064.
- [19] Tanaka H, Araki T. Simulation method of colloidal suspensions with hydrodynamic interactions: fluid particle dynamics[J]. *Phys Rev Lett*, 2000, **85**(6): 1338-1341.
- [20] Onishi J, Kawasaki A, Chen Y, Ohashi H. Lattice Boltzmann simulation of capillary interactions among colloidal particles[J]. *Comput Math Appl*, 2008, **55**(7): 1541-1553.
- [21] Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components[J]. *Phys Rev E*, 1993, **47**(3): 1815-1819.
- [22] Liang G, Chen Y, Zeng Z, Ohashi H, Chen S. Simulation of self-assemblies of colloidal particles partially immersed in a liquid layer on a substrate with a lattice Boltzmann pseudo-solid mode[R]. Bangalore: DSFD, 2012.
- [23] Shan X. Multicomponent lattice Boltzmann model from continuum kinetic theory[J]. *Phys Rev E*, 2010, **81**(4): 045701(1-4).
- [24] Guo Z, Zheng C, Shi B. Discrete lattice effects on the forcing term in the lattice Boltzmann method[J]. *Phys Rev E*, 2002, **65**(4): 46308(1-6).
- [25] Yunker P J, Still T, Lohr M A, Yodh A G. Suppression of the coffee-ring effect by shape-dependent capillary interactions[J]. *Nature*, 2011, **476**(7360): 308-311.



# Lateral Capillary Forces Between Two Spherical Particles: a Lattice Boltzmann Study

LIANG Gong-you<sup>1</sup>, ZENG Zhong<sup>1,2</sup>, ZHANG Yong-xiang<sup>1</sup>,  
ZHANG Liang-qi<sup>1</sup>, XIE Hai-qiong<sup>1</sup>, CHEN Yu<sup>3</sup>

- (1. *Department of Engineering Mechanics, College of Resource and Environment Science, Chongqing University, Chongqing 400044, P. R. China;*
2. *State Key Laboratory of Coal Mine Disaster Dynamics and Control, Chongqing University, Chongqing 400044, P. R. China;*
3. *Department of Human and Engineered Environmental Studies, Graduate School of Frontier Sciences, The University of Tokyo, Tokyo 1138656, Japan)*

**Abstract:** A three-dimensional simulation study on the lateral capillary forces (LCFs) between two floating and immersion spherical particles was carried out, using a modeling approach introduced in the framework of Shan-Chen lattice Boltzmann model for multi-component fluids. Solid-fluid interactions and wetting property of a colloidal particle could be taken into account at the mesoscopic level using a simple manner. Results show good agreement with theoretical results, and the so called “ $1/L$ ” theory is demonstrated. At the same time, the linear relationship between immersion LCF and fluid interfacial tension for fixed interparticle distance is well achieved. These demonstrate that the model is a promising tool for the simulation of phenomenon such as self-assemblies of colloidal particles.

**Key words:** lattice Boltzmann method; solid-liquid two-phase flow; lateral capillary forces; hydrodynamic interactions