

# 液滴在固体平表面上均匀蒸发过程的 格子 Boltzmann 模拟\*

谢驰宇<sup>1</sup>, 张建影<sup>2</sup>, 王沫然<sup>1</sup>

(1. 清华大学 工程力学系, 北京 100084;  
2. 北京大学 工学院, 北京 100871)

**摘要:** 通过格子玻尔兹曼(lattice Boltzmann method, LBM)数值模拟,研究了液滴在固体平表面上蒸发过程形状变化的机理,揭示了不同静态接触角下液滴蒸发过程中重力对其形状变化的影响规律.结果表明,重力的影响随着液滴尺度的减小而减弱,达到某一临界点后,重力对蒸发过程的影响可以忽略.模拟定量确定了液滴尺寸的这一临界值,并分析了蒸发过程中几个典型时刻液滴内部的流场分布,进一步研究了重力的影响.

**关键词:** 格子 Boltzmann 方法; 液滴蒸发; 重力影响; 多相流

**中图分类号:** O359+.1      **文献标志码:** A

**doi:** 10.3879/j.issn.1000-0887.2014.03.002

## 引 言

液滴在固体平表面的蒸发问题不仅与许多工程应用紧密相关,并且在日常生活中也十分常见<sup>[1]</sup>,比如著名的“咖啡环”效应<sup>[2-3]</sup>.由于液滴蒸发在颗粒合成<sup>[4]</sup>、DNA 阵列排布<sup>[5]</sup>和疾病检测<sup>[6]</sup>等诸多方面的新应用,这一现象再次引起了广泛地关注.

对于液滴的蒸发问题,前人在实验、理论以及数值模拟等方面做了很多的工作<sup>[1-10]</sup>,探讨了影响液滴蒸发过程形状的多种因素,但绝大多数研究都只是集中在小于毛细长度(capillary length,例如,对于水滴,毛细理论给出为 2.7 mm)的尺度范围内进行的讨论,并认为在这一尺寸范围内可以忽略重力的影响.

经过数十年的发展,格子 Boltzmann 方法(LBM)因其边界条件处理相对简单、易于处理复杂传递过程问题等优点<sup>[11-14]</sup>,已经成为了流动传热等问题的有力数值研究工具之一.液滴的蒸发属于有明显分界面的两相流问题.对于这一类的两相流问题,前人已经发展了多种 LBM 计算模型:Gunstensen 等提出了染色模型<sup>[15-16]</sup>,Shan 和 Chen 提出了拟势模型<sup>[17]</sup>,Swift 等提出了自由能模型<sup>[18]</sup>,以及 He 等提出的平均场模型<sup>[19-20]</sup>.虽然这些模型在一些特定情况能得到较准

\* 收稿日期: 2013-09-28; 修订日期: 2013-12-17

**基金项目:** 国家自然科学基金(51176089);国家重点基础研究发展计划(973 计划)(2013CB228301)

**作者简介:** 谢驰宇(1990—),男,江西人,硕士生(E-mail: chiyu.xie@gmail.com);

张建影(1982—),女,吉林人,博士(E-mail: zhangjy11@yahoo.cn);

王沫然(1977—),男,吉林人,教授,博士,博士生导师(通讯作者).

E-mail: mrwang@tsinghua.edu.cn).

确的模拟结果,但它们有一个共同的缺陷,即难于处理两相密度比很大的情况,因此难以计算真实的物理问题.基于此,Zheng 等<sup>[21]</sup>提出了一种新的自由能模型,能够很好地解决大密度比的两相流问题.

本文采用 Zheng 等提出的多相 LBM 模型对液滴在固体平表面上的蒸发过程进行了数值模拟.首先对模拟方法及程序的准确性进行了验证;然后着重研究了在不同静态接触角下液滴蒸发过程中重力对其形状变化的影响规律,并确定了重力影响的临界液滴尺寸;最后给出了蒸发过程中几个典型时刻液滴内部的流场分布并做了相应分析讨论.

## 1 数值模拟方法与计算模型

Zheng 等提出自由能模型的主要思想是通过引入两个分布函数  $f_i$  和  $g_i$ , 分别对流体的质量和动量输运过程以及两相界面迁移过程进行演化.其离散化的 LB 方程为

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - f_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_f} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)) + \frac{3\Delta t \omega_i \mathbf{c}_{i\alpha} (\mu \partial_\alpha \phi + n f_g)}{c^2}, \quad (1)$$

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{c}_i \Delta t, t + \Delta t) - g_i(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{\tau_g} (g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{\text{eq}}(\mathbf{x}, t)), \quad (2)$$

其中,角标  $i$  为离散的速度方向,  $\alpha$  代表空间坐标, eq 代表平衡态,  $\mathbf{c}_i$  为离散的格子速度,  $\omega_i$  为权重系数,  $\mu$  为化学势,  $f_g$  为外力对应的加速度,  $\phi = (\rho_A - \rho_B)/2$  为两相界面示踪参数,  $n = (\rho_A + \rho_B)/2$  为两相平均密度,其中 A 代表高密度相, B 代表低密度相.

本文采用 Chapman-Enskog 展开,上述两个离散化的 LB 方程能够在二阶精度范围内很好地还原为宏观 Navier-Stokes 方程和 Cahn-Hilliard 方程.其中 Cahn-Hilliard 方程 ( $\partial_t \phi + (\mathbf{u} \cdot \nabla) \phi = M \nabla^2 \mu$ ) 广泛地应用于相分离和扩散问题的过程描述,  $\mathbf{u}$  为速度矢量,  $M$  为迁移率;在两相流问题中用于示踪相界面的变化过程,并能很好地考虑大密度比(可超过 1 000)的问题.因此, Zheng 等的模型能够很准确地模拟大密度比的两相流问题.

本文数值模拟采用的物理模型如图 1 所示,计算格子数量为  $250 \times 80$ .液滴初始为半圆状(直径为 80 格子大小),位于如图所示的位置.其中  $d$  为过程中液滴两端最大间距,  $h$  为液滴最大高度,  $\theta$  为接触角.液相设置为水,气相设置为空气,相关物性参数为:水密度  $\rho_L = 1\,000 \text{ kg/m}^3$ , 粘度  $\nu_L = 1.006 \times 10^{-6} \text{ m}^2/\text{s}$ ;空气密度  $\rho_G = 1.205 \text{ kg/m}^3$ , 粘度  $\nu_G = 1.506 \times 10^{-5} \text{ m}^2/\text{s}$ ;界面张力  $\sigma = 0.072 \text{ N/m}$ ,重力加速度  $f_g = 9.81 \text{ m/s}^2$ ,迁移率  $M = 0.009 \text{ m}^3 \cdot \text{s}/\text{kg}$ .

本文讨论在两个不同尺度(格子空间间隔分别为  $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$  和  $\Delta x = 0.01 \text{ mm}$ )和 3 种不同的液固静态接触角  $\theta$  ( $45^\circ$ ,  $90^\circ$  和  $145^\circ$ ) 情况下重力对液滴蒸发过程的影响.

## 2 模拟结果与讨论

### 2.1 数值验证

对于图 1 所示的相同初始状态,给定了 3 种不同的液固静态接触角  $\theta$  ( $45^\circ$ ,  $90^\circ$  和  $145^\circ$ ),若忽略重力影响并且不考虑蒸发,当液滴达到稳态时,接触角应由初始状态  $90^\circ$  变化到相应的静态接触角.模拟结果如图 2 所示,经测量,稳态时 3 种情况接触角分别为  $44.7^\circ$ ,  $90.1^\circ$  和  $145.2^\circ$ ,与预期结果符合很好,误差小于 0.67%,验证了本文程序的正确性.

### 2.2 重力对液滴蒸发过程的影响

图 3 给出了在重力作用下不考虑蒸发时的液滴稳态图;对比了两个尺度下(格子尺寸分

别为  $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$  和  $\Delta x = 0.01 \text{ mm}$ ) 重力对液滴稳态形状的影响。

可以看出,在尺度很小  $\Delta x = 0.01 \text{ mm}$  时,液滴的稳态形状和不考虑重力的情况几乎完全一样,重力对液滴的稳态形状影响很小;而在尺度较大  $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$  时,对于给定的 3 种不同静态接触角,液滴的稳态形状比不考虑重力条件下的稳态形状都要扁平许多,重力对液滴的稳态形状有较大影响.其原因在于随着尺度的减小,液滴比表面积增大,重力与表面张力的比值随之减小,重力的影响逐渐减弱,而表面张力的影响逐渐增强,减小到某一临界尺寸之后,重力的影响可以忽略。

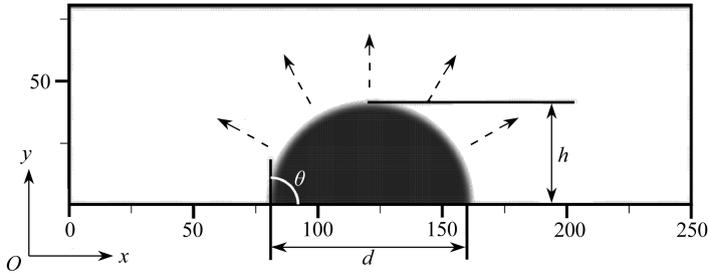


图 1 初始时刻液滴状态(采用均匀蒸发假设)

Fig.1 Initial state of the droplet (under uniform evaporation assumption)

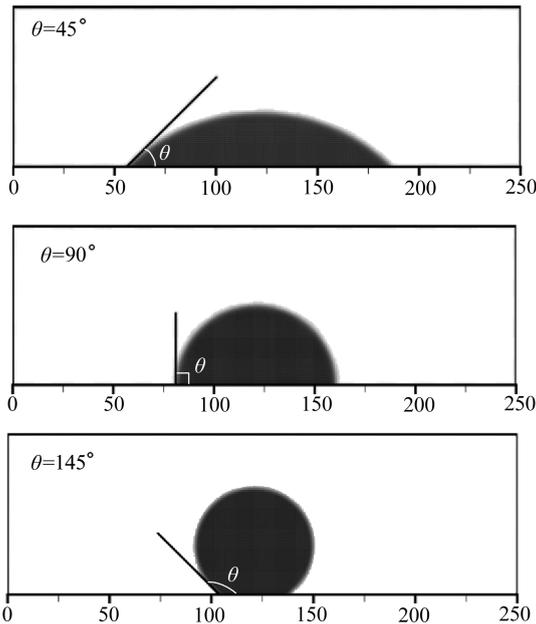


图 2 数值验证 ( $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$ )

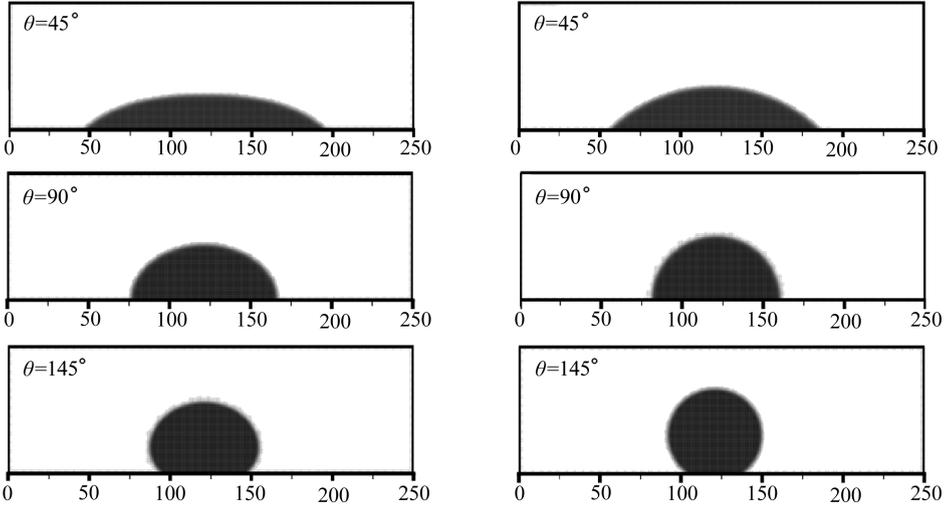
Fig.2 Numerical validation ( $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$ )

由于液滴尺寸随着蒸发过程的进行而不断减小,那么一定存在一个临界液滴尺寸,小于此临界尺寸时,重力对蒸发过程中液滴形状的影响可以忽略.图 4 和图 5 显示了液滴蒸发过程中重力存在影响的临界尺寸的确定方法.计算条件为:静态接触角  $\theta = 145^\circ$ ,格子尺寸  $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$ ,蒸发线速率  $1.5 \text{ mm/s}$ 。

图 4 为液滴最大高度与直径之比  $h/d$  随液滴蒸发时间  $t$  的变化关系,对比了忽略重力和考虑重力的两种情况.结果表明,忽略重力情况下,在经过初始时刻的波动后, $h/d$  很快达到一稳

态值;而在考虑重力情况下, $h/d$  缓慢增加,到 1.5 s 左右时,也近似达到同一稳态值.而这一相同的稳态值,正是液滴处于图 2( $\theta = 145^\circ$ ) 所示稳态形状时的  $h/d$  值.

由于  $h/d$  可以表征液滴的形状,因此对于考虑重力的蒸发过程,在某一临界时刻之后, $h/d$  若达到与忽略重力情况下液滴稳态形状时的相同值,表明此时液滴形状与忽略重力情况下的稳态形状相同,进一步说明此时重力对蒸发过程的影响可以忽略.所以,此临界时刻下液滴的尺寸就是重力对蒸发过程存在影响的临界尺寸.



(a)  $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$

(b)  $\Delta x = 0.01 \text{ mm}$

图 3 不同尺度下重力对液滴稳态形状的影响

Fig.3 Effect of gravity on the droplet shape at different scales

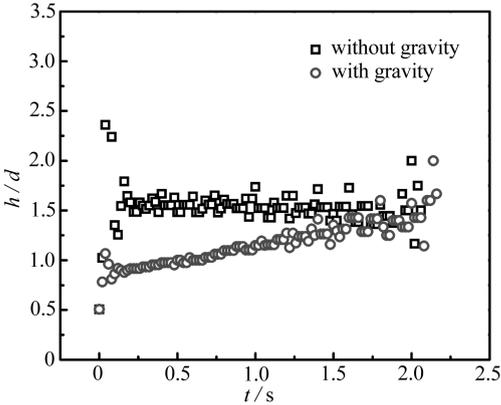


图 4 高径比  $h/d$  随液滴蒸发时间  $t$  的变化关系

Fig.4 Droplet height to diameter ratio  $h/d$  vs. evaporation time  $t$

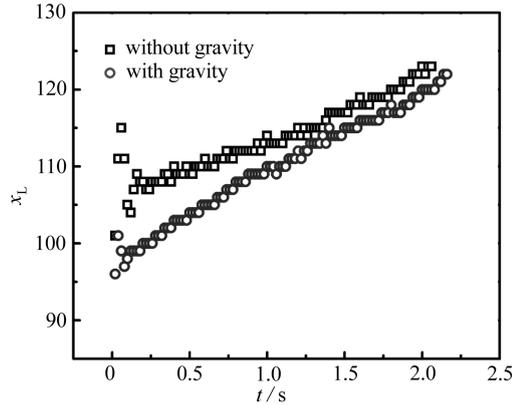


图 5 接触线左边缘三相接触点坐标  $x_L$  随液滴蒸发时间  $t$  的变化关系

Fig.5 Left edge coordinate  $x_L$  of the contact line vs. evaporation time  $t$

图 5 为接触线左边缘三相接触点坐标  $x_L$  随液滴蒸发时间  $t$  的变化关系,同样对比了忽略重力和考虑重力的两种情况,从另一个角度确定了这个临界尺寸.曲线的斜率表征了接触线左边缘由于蒸发产生的收缩速率.从图中可以看出,随着蒸发的进行,忽略重力和考虑重力的两

种情况的曲线斜率逐渐趋近,到 1.5 s 左右时,二者斜率几乎一致。

由于液滴的形状影响着边缘的收缩速率,收缩速率不同,表明液滴的形状不同.因此对于考虑重力的蒸发过程,在某一临界时刻之后,若曲线斜率达到与忽略重力情况下相同的斜率值,表明此时液滴形状与忽略重力情况下的形状相同,进一步说明此时重力对蒸发过程的影响可以忽略.所以,这一临界时刻下液滴的尺寸也就是重力对蒸发过程存在影响的临界尺寸。

综合图 4 和图 5 的结果,可以得出:重力对蒸发过程存在影响的临界时刻范围为 1.5~1.7 s,对应的液滴临界直径范围为 1.2~1.6 mm.这一临界尺寸范围比水滴毛细长度 2.7 mm 约小 50%,因此,对于前人的许多研究,需要重新考虑重力的影响。

应指出,图 4 和图 5 初始时刻的波动对应着液滴由初始状态(如图 1 所示)迅速变化到趋于给定静态接触角  $\theta = 145^\circ$  的过程;而最后阶段的大幅波动主要是由于此阶段液滴尺寸已经很小,所占有的格子数量很少造成的.若格子精度提高,临界尺寸的计算将更加精确。

### 2.3 蒸发过程中液滴内部流场分布

图 6 对比了蒸发过程中 0.2 s 和 1.5 s 两个时刻液滴内部的流场分布,静态接触角为  $145^\circ$ ,格子尺寸为  $\Delta x = 0.1 \text{ mm}$ 。

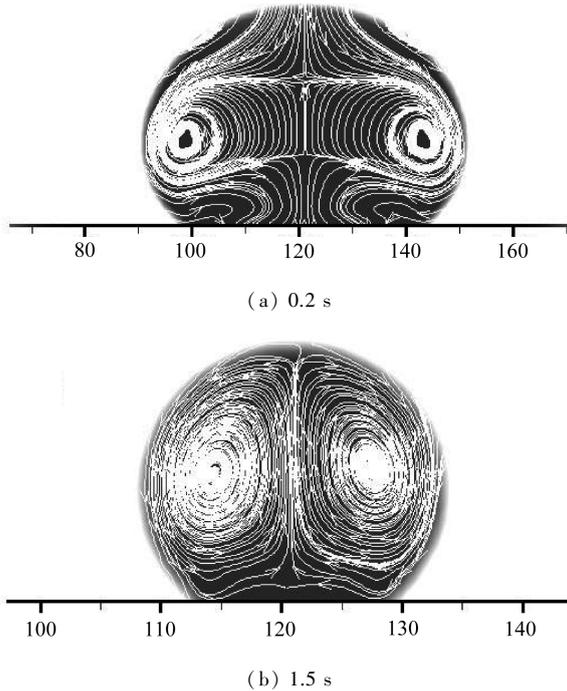


图 6 蒸发过程中不同时刻液滴内部流场分布

Fig.6 Inside flow patterns of the droplet during evaporation at different times moments

从图中可以看出,两个时刻液滴内部都出现了“Marangoni 涡”<sup>[22]</sup>,1.5 s 时的两个涡几乎充满整个液滴,而 0.2 s 时的涡则相对小很多.并且经计算,得到两个时刻液滴内部流动的最大速度都出现在漩涡边缘,分别为 6.03 mm/s 和 8.66 mm/s,而 1.5 s 时的最大速度比 0.2 s 时的最大速度小 30.4%.结合图 4 和图 5,可知在 0.2 s 时重力对液滴形状存在很大影响,而 1.5 s 时,重力的影响几乎可以忽略.这表明重力对蒸发过程中液滴内部的流场也存在较大影响.当重力影响很小时,“Marangoni 涡”相对很大,流场速度较小;而重力影响比较大时,由于重力作用,“Marangoni 涡”被压缩,相对尺寸较小,流场速度较大。

### 3 结 论

本文通过 LBM 数值模拟与理论分析,对液滴在固体平表面上的蒸发过程进行了研究.在验证了本文所采用的 LBM 模型及程序的准确性之后,研究了在不同静态接触角下液滴蒸发过程中重力对其形状变化的影响,提出了确定重力存在影响的临界液滴尺寸的两种方法.发现对于水滴,这个临界尺寸比其毛细长度 2.7 mm 约小 50%.通过对比蒸发过程中两个时刻的流场分布,发现重力不仅对蒸发液滴的形状产生影响,而且对其内部的流场分布有较大影响.进而,流场分布对液滴内部颗粒运动及分布产生的影响将是下一步研究的重点.

**致谢** 本文作者感谢新加坡国立大学机械工程系 C. Shu 教授有益的讨论和建议.

#### 参考文献(References):

- [1] Kim J-H, Ahn S I, Kim J H, Zin W-C. Evaporation of water droplets on polymer surfaces[J]. *Langmuir*, 2007, **23**(11): 6163-6169.
- [2] Deegan R D, Bakajin O, Dupont T F, Huber G, Nagel S R, Witten T A. Capillary flow as the cause of ring stains from dried liquid drops[J]. *Nature*, 1997, **389**(6653): 827-829.
- [3] 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.
- [4] Malaquin L, Kraus T, Schmid H, Delamarche E, Wolf H. Controlled particle placement through convective and capillary assembly[J]. *Langmuir*, 2007, **23**(23): 11513-11521.
- [5] Hu H, Larson R G. Evaporation of a sessile droplet on a substrate[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2002, **106**(6): 1334-1344.
- [6] Wong T-S, Chen T-H, Shen X, Ho C-M. Nanochromatography driven by the coffee ring effect [J]. *Analytical Chemistry*, 2011, **83**(6): 1871-1873.
- [7] Brutin D, Zhu Z, Rahli O, Xie J, Liu Q, Tadriss L. Sessile drop in microgravity: creation, contact angle and interface[J]. *Microgravity Science and Technology*, 2009, **21**(1): 67-76.
- [8] Cazabat A-M, Guena G. Evaporation of macroscopic sessile droplets[J]. *Soft Matter*, 2010, **6**(12): 2591-2612.
- [9] Gelderblom H, Marín Á G, Nair H, Van Houselt A, Lefferts L, Snoeijer J H, Lohse D. How water droplets evaporate on a superhydrophobic substrate[J]. *Physical Review E*, 2011, **83**(2): 026306.
- [10] Ruiz O E, Black W Z. Evaporation of water droplets placed on a heated horizontal surface[J]. *Journal of Heat Transfer*, 2002, **124**(5): 854-863.
- [11] Chen S, Doolen G D. Lattice Boltzmann method for fluid flows[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 1998, **30**(1): 329-364.
- [12] Aidun C K, Clausen J R. Lattice-Boltzmann method for complex flows[J]. *Annual Review of Fluid Mechanics*, 2010, **42**(1): 439-472.
- [13] Wang M, Kang Q. Electrokinetic transport in microchannels with random roughness[J]. *Analytical Chemistry*, 2009, **81**(8): 2953-2961.
- [14] Wang M. Structure effects on electro-osmosis in microporous media [J]. *Journal of Heat Transfer*, 2012, **134**(5): 051020.
- [15] Gunstensen A K, Rothman D H, Zaleski S, Zanetti G. Lattice Boltzmann model of immiscible fluids[J]. *Physical Review A*, 1991, **43**(8): 4320-4327.

- [16] Gunstensen A K, Rothman D H. Lattice-Boltzmann studies of immiscible two-phase flow through porous media[J]. *Journal of Geophysical Research*, 1993, **98**(B4): 6431-6441.
- [17] Shan X, Chen H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components[J]. *Physical Review E*, 1993, **47**(3): 1815-1819.
- [18] Swift M R, Osborn W R, Yeomans J M. Lattice Boltzmann simulation of nonideal fluids[J]. *Physical Review Letters*, 1995, **75**(5): 830-833.
- [19] He X, Chen S, Doolen G D. A novel thermal model for the lattice Boltzmann method in incompressible limit[J]. *Journal of Computational Physics*, 1998, **146**(1): 282-300.
- [20] He X, Chen S, Zhang R. A lattice Boltzmann scheme for incompressible multiphase flow and its application in simulation of Rayleigh-Taylor instability [J]. *Journal of Computational Physics*, 1999, **152**(2): 642-663.
- [21] Zheng H W, Shu C, Chew Y T. A lattice Boltzmann model for multiphase flows with large density ratio[J]. *Journal of Computational Physics*, 2006, **218**(1): 353-371.
- [22] Hu H, Larson R G. Marangoni effect reverses coffee-ring depositions[J]. *The Journal of Physical Chemistry B*, 2006, **110**(14): 7090-7094.

## Lattice Boltzmann Simulation of Droplet Evaporation on Flat Solid Surface

XIE Chi-yu<sup>1</sup>, ZHANG Jian-ying<sup>2</sup>, WANG Mo-ran<sup>1</sup>

(1. *Department of Engineering Mechanics, Tsinghua University,*

*Beijing 100084, P.R.China;*

2. *College of Engineering, Peking University,*

*Beijing 100871, P.R.China)*

**Abstract:** Mechanisms of droplet evaporation on flat solid surface were investigated with the Lattice Boltzmann method. Effect of gravity on the droplet shape change during evaporation in the cases of different static contact angles was detailedly analyzed. The results show that, as the droplet size decreases, the gravity effect decreases; and when the size reaches a critical value, the gravity effect grows negligible. This critical value for a water droplet was calculated for specific parameters, which was 50% lower than the value given by the classical capillary theory. Moreover, the inside-droplet flow patterns are also considerably influenced by gravity and the droplet size.

**Key words:** lattice Boltzmann method; droplet evaporation; gravity effect; multiphase flow

**Foundation item:** The National Natural Science Foundation of China(51176089); The National Basic Research Program of China (973 Program) (2013CB228301)