

# 不同润湿性表面固着双液滴蒸发过程LBM数值模拟

翁志浩, 方可宁, 单彦广\*

上海理工大学能源与动力工程学院, 上海  
Email: wzh207140631@163.com, \*shan@usst.edu.cn

收稿日期: 2021年4月22日; 录用日期: 2021年7月20日; 发布日期: 2021年7月28日

## 摘要

阵列液滴蒸发在蛋白质及核酸生物打印及胶体液滴蒸发自组装领域有重要应用。本文采用格子 Boltzmann 方法模拟了固着基板上双液滴的蒸发过程, 研究了基板润湿性及液滴间距对双液滴蒸发过程的影响, 模拟结果与文献中实验结果吻合良好。研究表明, 双液滴在加热基板上蒸发时发生铺展合并现象是由基板润湿性及液滴间初始放置间距共同决定的。当出现合并现象时, 液滴合并后以单液滴形态进行蒸发, 其蒸发寿命远大于未发生合并现象时的液滴蒸发寿命。当未发生合并现象时, 受液滴间有限空间抑制, 液滴面向大空间一侧的蒸发速率大于液滴相邻侧; 液滴为了维持球形形态, 内部产生了向蒸发速率较快一侧输运流体的微流动, 导致液滴左右两侧接触线收缩不对称, 产生液滴中心外迁现象。与单液滴蒸发状态相比, 成对液滴蒸发寿命比单液滴蒸发时延长, 但小于发生合并后的蒸发寿命。论文通过大量模拟, 获得了通过基板润湿性及液滴间距判断液滴蒸发过程是否合并的判据。

## 关键词

双液滴蒸发, 液滴合并, 接触线非对称收缩, 格子 Boltzmann 方法

# LBM Numerical Simulation of Sessile Paired Droplets Evaporation on Different Wettability Surfaces

Zhihao Weng, Kening Fang, Yanguang Shan\*

School of Energy and Power Engineering, University of Shanghai for Science and Technology, Shanghai  
Email: wzh207140631@163.com, \*shan@usst.edu.cn

Received: Apr. 22<sup>nd</sup>, 2021; accepted: Jul. 20<sup>th</sup>, 2021; published: Jul. 28<sup>th</sup>, 2021

\*通讯作者。

## Abstract

Array droplets evaporation has important applications in the fields of protein and nucleic acid bioprinting and colloidal droplet evaporation self-assembly. In this paper, the lattice Boltzmann method is used to simulate the evaporation process of paired droplets on a sessile substrate, and the influence of substrate wettability and droplet spacing on the paired droplets evaporation process was studied. The simulation results are in good agreement with the experimental results in the literatures. The research results show that the phenomenon of spreading and merging of paired droplets when they evaporate on the heated substrate is determined by the wettability of the substrate and the initial spacing between the droplets. When the merging phenomenon occurs, these droplets are merged to evaporate in the form of a single droplet, and the evaporation life of the droplet is much longer than that when the merging phenomenon does not occur. When there is no merging phenomenon, restrained by the limited space between the droplets, the evaporation rate of the droplet facing the large space is greater than that of the adjacent side of the droplet; in order to maintain the spherical shape of the droplet, there is an internal transfer to the faster evaporation rate. The micro-flow of the transport fluid causes the contact lines on the left and right sides of the droplet to contract asymmetrically, resulting in the phenomenon of the center of the droplet moving out. Compared with the single droplet evaporation state, the evaporation life of the paired droplets is longer than that of the single droplet evaporation, but is shorter than the evaporation life after merging. Through a large number of simulations, the paper obtained the criterion for judging whether the droplet evaporation process is merged by the wettability of the substrate and the droplet spacing.

## Keywords

Paired Droplets Evaporation, Droplets Merge, Asymmetrical Contraction of the Contact Line, Lattice Boltzmann Method

Copyright © 2021 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

## 1. 引言

固着液滴的蒸发，是自然界中一种常见的物理现象，普遍存在于人类的生活生产之中，这个过程受到基板的粗糙度、温度、环境温度和湿度以及液滴性质等因素的影响。固着单液滴的蒸发在微流控技术、DNA 分析及生物医药等领域有着重要应用，已经进行了广泛而深入的研究[1]-[8]。在蛋白质和核酸的生物打印及胶体蒸发自组装制备纳米结构器件的应用中，涉及多液滴以一定阵列规律分布的蒸发过程，因此，阵列分布液滴的蒸发日益受到关注。Laghezza 等[9]比较了单液滴和周围存在有限个分散液滴下中心液滴的蒸发寿命，发现考虑三维扩散效应时，中心液滴的蒸发寿命能增加约 60%。Jyoti、Shaikeea 和 Basu 等[10]通过实验总结出双液滴相互影响延长蒸发寿命与液滴间距之间的关系。Bansal [11]和 Hatte [12]等对开放矩形通道内固着单液滴的蒸发动力学进行了研究，发现由于通道内壁面对蒸汽扩散的抑制，液滴蒸发寿命增加。Carrier、Shahidzadeh 和 Zargar [13]通过实验及理论研究了固着单液滴和多液滴的蒸发速率，研究发现液滴蒸发速率与液滴线性尺寸成正比。Shaikeea 和 Basu [14]研究了成对的纳米胶体液滴在 PDMS 表面上蒸发的行为。他们观察到两个液滴之间的蒸汽介导相互作用会影响纳米胶体液滴的蒸发行为。他

们发现,与单个液滴相比,一对液滴蒸发时会表现出接触角不对称,不对称流动模式以及不同的屈曲行为。Pradhan 和 Panigrahi [15]研究了放置在玻璃基板上的两个含有微珠的液滴的蒸发动力学和沉积模式。他们发现相邻液滴的存在会影响液滴内部的流动模式,从而导致微珠在两个液滴的相邻区域的沉积较弱。上述实验研究为建立阵列液滴蒸发模型提供了理论基础。同时,实验中还观察到,不同润湿性表面放置的两个相邻液滴,在特定条件下蒸发时会发生合并现象。为了揭示相邻液滴合并机理,阐明基板润湿性和液滴间距对合并和蒸发过程的影响,本文拟通过数值模拟的方法对双液滴蒸发及其合并过程进行模拟。LBM 方法由于边界处理简便,无需其他跟踪界面和其他优势,在相变及自由表面问题数值求解方面有独特优势,关于此种方法的研究已有很多[16] [17]。Lee 等[18]提出改善不可压缩的二元流体的边界条件,并将模拟液滴撞击干燥表面的过程与实验结果进行了比较。结果表明,具有中等接触角的液滴可以被准确地预测,但是具有较大接触角的液滴预测的却不够精确,后来,Latifiyan 等人[19]结合二维流体模型和热网格来模拟液体在多孔介质中的渗透过程,并研究了无量纲参数、孔隙率、接触角和密度比对渗透率和蒸发率的影响。Gong 等[20]改进了热格子模型,它可以有效地模拟多相流和相变,并可以解决较大温度范围内的复杂流体问题。本文选择一种经过改良的热格子 LBM 方法,研究了液滴的初始间距和基板的润湿性对双液滴蒸发的影响并模拟了双液滴蒸发过程中液滴的蒸发特性、内部流动和残余质量的变化,研究基板的润湿性和液滴间距对液滴合并和蒸发寿命的影响。

## 2. 数值方法

### 2.1. 多相流模型

LBM 方法通过流体粒子分布函数描述流场内固定格子的运动过程,其演化方程为:

$$f_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t, t + \delta_t) - f_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_f} (f_i(\mathbf{x}, t) - f_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t)) + \Delta f_i(\mathbf{x}, t) \quad (1)$$

其中  $f_i$  为粒子的分布函数,  $i = 0, 1, 2, \dots, b-1$  是离散速度的方向,  $\mathbf{x}$  和  $t$  表示位置和时间。  $\mathbf{e}_i$  代表离散速度,  $\tau$  代表松弛时间,与运动粘度  $\nu$  的关系为  $\nu = (\tau - 0.5)c_s^2 \delta_t$ ,  $\delta_t$  是时间步长,  $c_s$  是格子声速,  $c = \delta_x / \delta_t$ ,  $\delta_x$  为网格步长。

演化方程中的  $\Delta f_i(\mathbf{x}, t)$  为分布函数中的非平衡部分,可表示为:

$$\Delta f_i(\mathbf{x}, t) = f_i^{(eq)}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u} + \Delta \mathbf{u}) - f_i^{(eq)}(\rho(\mathbf{x}, t), \mathbf{u}) \quad (2)$$

式中  $\Delta \mathbf{u}$  是在  $\delta_t$  时刻,由于力  $\mathbf{F}$  导致的速度变化  $\Delta \mathbf{u} = \mathbf{F} \delta_t / \rho$ 。

力项  $\mathbf{F}$  表示为粒子点受到力的总和:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}) + \mathbf{F}_s(\mathbf{x}) + \mathbf{F}_g(\mathbf{x}) \quad (3)$$

$\mathbf{F}_{int}(\mathbf{x})$  为各粒子间的相互作用力,表示为:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{int}(\mathbf{x}) = & -\beta \psi(\mathbf{x}) \sum_{i=0}^8 G(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) \psi(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) \mathbf{e}_i \\ & - \frac{1-\beta}{2} \sum_{i=0}^8 G(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) \psi^2(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_t) \mathbf{e}_i \end{aligned} \quad (4)$$

$\psi(\mathbf{x})$  为粒子间的相互作用势,主要由粒子的密度  $\rho$  及压力  $p$  决定:

$$\psi(\mathbf{x}) = \sqrt{\frac{2(p - \rho c_s^2)}{c_0 g}} \quad (5)$$

其中取值  $c_0 = 6$ 。此外  $\beta$  为权重因子，用于提高数值计算稳定性，根据状态方程取值不同。

$F_s(\mathbf{x})$  为流体与固壁面之间的相互作用力，表示如下：

$$F_s(\mathbf{x}) = -g_s \psi(\mathbf{x}) \sum_{i=0}^8 \omega_i s(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_i) \mathbf{e}_i \quad (6)$$

其中  $g_s$  为表示流固相互作用强度的参数。 $s(\mathbf{x})$  用于区别固 - 流两相，流体相  $s(\mathbf{x}) = 0$ ，固体相  $s(\mathbf{x}) = 1$ 。

$F_g(\mathbf{x})$  为重力，可表示为：

$$F_g(\mathbf{x}) = (\rho(\mathbf{x}) - \rho_{ave}) \mathbf{g} \quad (7)$$

其中  $\mathbf{g}$  为重力加速度。

分布函数可根据以上公式得出，由此可统计得出粒子的密度及速度：

$$\rho = \sum_{i=0}^8 f_i \quad (8)$$

$$\mathbf{u} = \frac{1}{\rho} \sum_{i=0}^8 f_i \mathbf{e}_i \quad (9)$$

式(9)得到的速度并不是真正的物理速度，实际流速需要考虑力  $\mathbf{F}(\mathbf{x})$  的作用：

$$\mathbf{U} = \mathbf{u} + \frac{\mathbf{F} \delta_t}{2\rho} \quad (10)$$

## 2.2. 能量方程模型

采用 Boussinesq 近似，在此近似条件下，温度分布函数描述流场内温度场的变化过程，演化方程为：

$$g_i(\mathbf{x} + \mathbf{e}_i \delta_i, t + \delta_t) - g_i(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\tau_T} (g_i(\mathbf{x}, t) - g_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t)) + \delta_t \omega_i \phi_{vl} \quad (11)$$

其中  $\tau_T$  为无量纲松弛时间， $g_i$  为流体温度分布函数， $\delta_t \omega_i \phi_{vl}$  为参与气液相变的源项。

温度的平衡态分布函数为：

$$g_i^{(eq)}(\mathbf{x}, t) = \omega_i T \left[ 1 + \frac{\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{U}}{c_s^2} + \frac{(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{U})^2}{2c_s^4} - \frac{U^2}{2c_s^2} \right] \quad (12)$$

其中相变源项由文献得出：

$$\phi_{vl} = T \left[ 1 - \frac{1}{\rho c_v} \left( \frac{\partial p}{\partial T} \right)_\rho \right] \nabla \cdot \mathbf{U} \quad (13)$$

为了与以上的温度分布函数量级一致，将热扩散系数用格子公式表示：

$$\alpha = c_s^2 \left( \tau_T - \frac{1}{2} \right) \delta_t \quad (14)$$

则温度可由统计计算得到：

$$T = \sum_{i=0}^8 g_i \quad (15)$$

由于模拟两相间的密度差较大，因此选用 R-K 状态方程：

$$p = \frac{\rho RT}{1 - b\rho} - \frac{a\rho^2}{\sqrt{T_c}(1 + b\rho)} \quad (16)$$

其中  $a = 0.42748R^2T_c^{2.5}/p_c$  ,  $b = 0.08664RT_c/p_c$  , 设定  $a = 2/49$  、  $b = 2/21$  , 则可求得临界压力值  $p_c = 0.178426$  , 临界温度值为  $T_c = 0.196133$

### 3. 模型验证

#### 3.1. 计算域

本文模拟研究双液滴蒸发过程, 初始将两个半球形液滴放置在加热基板上进行蒸发, 几何模型由图 1 给出, 整体模拟计算域为  $L_x \times L_y$  , 取  $200 \times 200$  个网格数。假设滴在基板上的液滴初始接触角为  $90^\circ$  , 由于基板的润湿性自然也不相同, 液滴会在滴到基板上的一定时间内铺展或者收缩, 最后趋于稳定, 即达到所设置的静态接触角, 随后蒸发开始进行直到全部干燥完全。液滴初始半径  $R = 25$  , 液滴间空隙间距为  $\Delta x$  , 当液滴被至于加热基板上时可以看作球冠模型, 两液滴相邻侧三相接触线之间的距离。加热基板温度为  $T_w = 0.90 \times T_c$  , 初始环境温度  $T_s = 0.85 \times T_c$  , 液滴初始温度与环境温度相等。根据初始环境温度及 Maxwell 重构方程, 气相及液相密度分别取  $\rho_g = 0.5801$  、  $\rho_l = 5.9079$  。将模拟计算域的左边界和右边界设置为周期性边界条件, 该系统为开放系统, 上边界为对流边界条件, 下基板加热为无滑移边界条件。

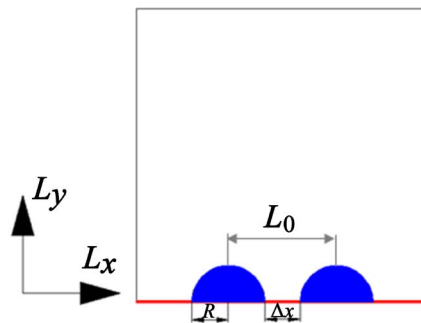


Figure 1. The geometric model  
图 1. 几何模型

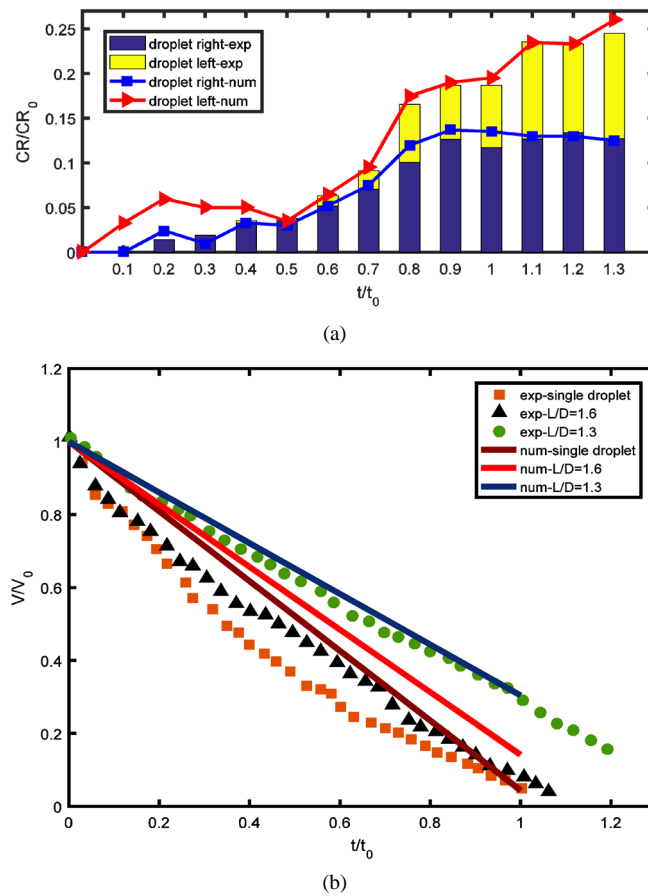
为了了解双液滴蒸发过程中的蒸发动力学和内部流动特性, 通过改变基板的粗糙度、液滴间初始间距等条件, 模拟了双液滴在不同的工况下的合并和干燥过程, 考察蒸发过程中液滴界面、接触直径的变化情况, 分析蒸发过程中系统内部流动特点。其中液滴的接触直径  $D$  为液滴与基板润湿表面的直径; 蒸发速率即计算域内液相质量变化量与初始液相总质量之比, 记为  $V_l$  , 其中液相的定义为密度值  $\rho_x \geq 0.5 \times (\rho_l + \rho_g)$  的区域。本文对时间进行无量纲化, 特征时间定义为  $t^* = t\sqrt{g/D}$  。在本文中对双液滴的蒸发进行模拟, 重力不可以忽略不计, 重力加速度为  $g = 1.0 \times 10^{-5}$  。

#### 3.2. 模拟验证

本文基于双液滴固着在基板上蒸发过程的实验数据[10], 验证模拟结果的准确性。图 2(a)为液滴在基板表面蒸发过程中体积比随蒸发时间的实验及模拟结果对比图, 其中定义  $L_0/D_0$  为液滴间距, 其中  $L_0$  为两个液滴中心之间的初始直径,  $D_0$  为液滴的初始接触直径。

下图中前缀为 exp 的数据为在 PDMS 基板上不同分离尺度下双液滴的蒸发过程中液滴体积随演化时间的变化趋势,  $V_0$  和  $V$  分别代表液滴的初始体积和蒸发过程中的瞬时体积,  $t_0$  和  $t$  分别代表单个液滴的蒸发时间和不同初始分离距离下双液滴的蒸发时间, 根据分离尺度不同分为以下三种情况:  $L_0/D_0 \rightarrow \infty$  时的单液滴蒸发过程对照组  $L_0/D_0 = 1.6$  时液滴间距较大的情况和  $L_0/D_0 = 1.3$  时液滴间距较小的情况。由图可知, 实验中液滴蒸发过程中体积比随时间基本呈线性减小的趋势。单液滴蒸发在时间比  $t/t_0$  等于 1 时

基本完成蒸发；当液滴间距较大时( $L_0/D_0 = 1.6$ )，蒸发时间相对较长在  $t/t_0 = 1.1$  时完成蒸发；当液滴间距较小时( $L_0/D_0 = 1.3$ )，液滴在  $t/t_0 = 1.3$  时完成蒸发。为验证计算模型的准确性，对相同物理条件下的双液滴蒸发过程进行模拟，求得液滴接触角为  $120^\circ$  时，以上实验结果的三种分离尺度条件下，液滴体积比随时间的变化趋势，即下图中前缀为 num 的趋势线。由上图模拟结果可知，液滴相对体积变化率与蒸发时间基本呈线性减小。双液滴的体积比减小随分离尺度  $L_0/D_0$  的增大而加快，当分离尺度  $L_0/D_0 \rightarrow \infty$  即单液滴蒸发时，体积比变化最快；当液滴间的分离尺度较大时，液滴的体积比减小速度较慢，蒸发时间较长。以上模拟结果与实验对比可知，液滴体积比随时间的变化整体趋势基本一致，都随时间增大呈线性减小，不同分离尺度下的液滴蒸发寿命也基本接近。但当液滴间分离尺度较大时，实验与模拟的误差较大，而分离尺度较小时，液滴蒸发的模拟结果与实验结果较为吻合。由图可知，液滴蒸发过程中体积比随时间呈线性减小的趋势。双液滴的体积比减小随液滴间距  $L_0/D_0$  的增大而加快，模拟结果与实验结果吻合良好。



**Figure 2.** Simulation verification. (a) Drop volume change with dimensionless time; (b) Comparison of contact radius changes on both sides of the droplet

**图 2.** 模拟验证。(a) 液滴体积随无量纲时间变化图；(b) 液滴两侧接触半径变化对比图

为进一步验证模型，对双液滴在基板上蒸发时液滴的接触半径变化与实验结果进行了对比。图 2(b) 为双液滴蒸发过程中左侧液滴三相接触线直径变化情况， $CR/CR_0$  为当前时刻相对上初始时刻的接触半径比，初始静态接触角为  $110^\circ$ ， $L_0/D_0 = 1.2$ 。图中柱状图部分为实验结果，折线部分为相同条件下模拟结果。由柱状图可知，液滴右侧区域的接触直径减小较快，蒸发初期液滴两侧接触直径减少量较少，随蒸

发持续进行,液滴右侧接触直径减少量较大,此时液滴中心左移趋势减缓,蒸发后期,两侧接触直径减少量趋于一致。图中折线部分为相同条件下,系统内双液滴蒸发过程中左侧液滴两侧的接触半径减小情况的模拟结果。如图可知,液滴蒸发后期,模拟基本与实验结果吻合较好,液滴中心两侧的接触直径变化情况由左侧偏大直至趋于一致。而在模拟初期,由于初始状态液滴呈半球形放置在基板上,接触线有一个收缩至稳定的过程,因此液滴接触直径模拟值在蒸发初期存在骤增过程,稳定后与实验值接近。

## 4. 结果及分析

### 4.1. 液滴初始间距对液滴蒸发过程的影响

为研究液滴初始放置间距对液滴蒸发过程的影响,将双半球形液滴以不同初始间距放置在加热基板上。基板接触角恒定为 $90^\circ$ ,即 $g_s$ 取值0.5224。液滴初始间距 $\Delta x$ 设置为12、10、8、6、4、2个格子数。图3、图4为基板润湿性为 $90^\circ$ 条件下,双液滴不同初始间距时发生铺展合并及蒸发过程中液滴界面变化的演化图。

由图可知,当液滴间初始间距 $\Delta x$ 小于6个格子数时,液滴在铺展及蒸发的过程中会发生合并现象,合并稳定后呈单液滴形状持续进行蒸发,液滴接触角保持不变,液滴接触直径不断减小,直至完全蒸干。

当液滴间初始间距 $\Delta x$ 大于或等于6个格子数时,双液滴在铺展及蒸发过程中并不会发生合并现象,液滴各自蒸发直至完成蒸发。随蒸发不断进行,液滴接触角保持不变,但由于液滴相邻侧液滴接触直径减小较快,液滴中心随蒸发进行不断外移,直至蒸发完成。考察同一演化时刻下的液滴界面情况可知,相较于发生合并现象的液滴铺展蒸发过程,不发生合并现象时液滴蒸干较快,完成蒸发所需时间也较短。

为了研究液滴间初始放置间距 $\Delta x$ 对液滴蒸发寿命的影响,图5给出了不同液滴初始间距下,液滴的剩余质量随时间变化的情况。液滴的剩余质量随着蒸发的进程线性减小,这与液滴蒸发过程中液滴接触直径的变化趋势相似,减小趋势根据液滴蒸发过程是否发生合并现象,可分为两类。当液滴蒸发过程中不发生合并时,液滴以单液滴形式进行蒸发,液滴的剩余质量随时间线性减小。相比较液滴不发生合并时的液滴剩余质量变化,当液滴蒸发过程中合并时,液滴剩余质量减小更慢,相同质量液滴的蒸发寿命也 longer。

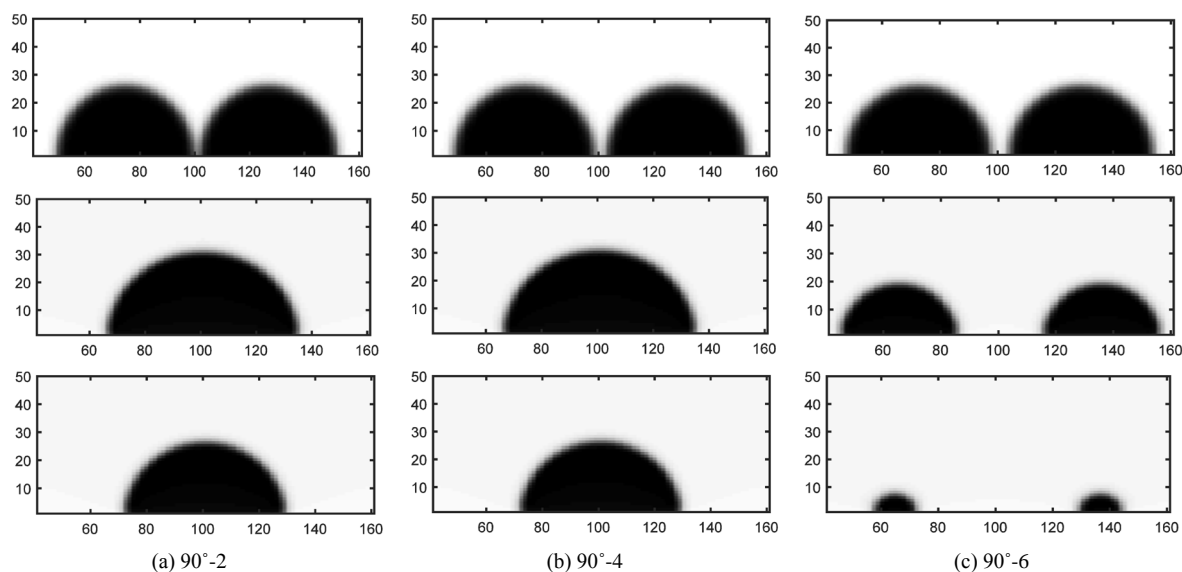


Figure 3. Diagram of evaporation process evolution with different initial intervals (interval 2, 4, 6)

图3. 液滴间初始间距不同时双液滴蒸发过程演化图(液滴间距2、4、6)

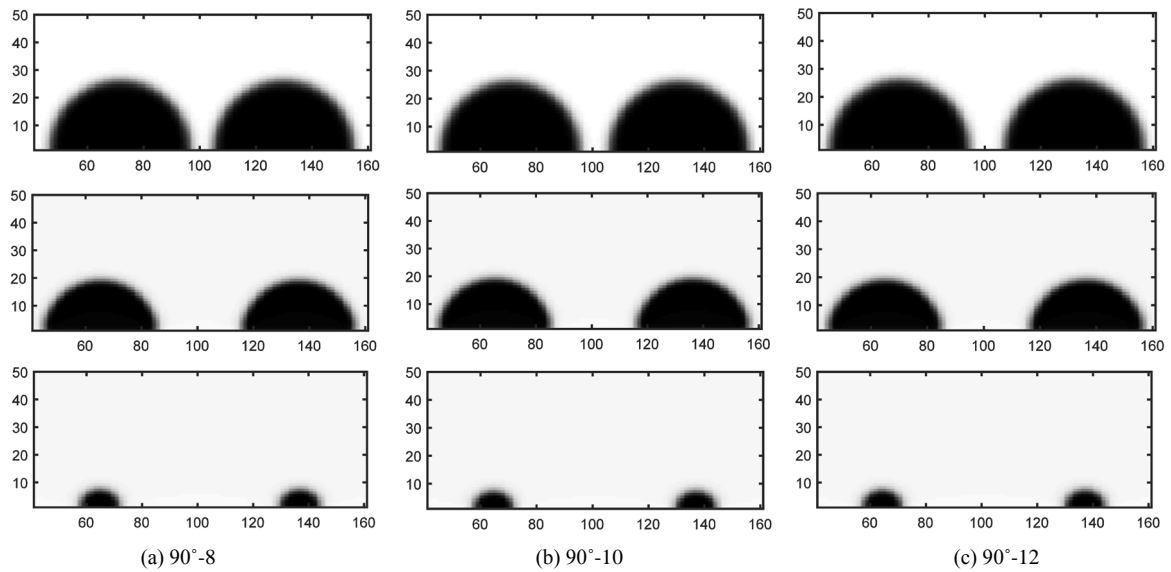


Figure 4. Diagram of evaporation process evolution with different initial intervals (interval 8, 10, 12)

图 4. 液滴间初始间距不同时双液滴蒸发过程演化图(液滴间距 8、10、12)

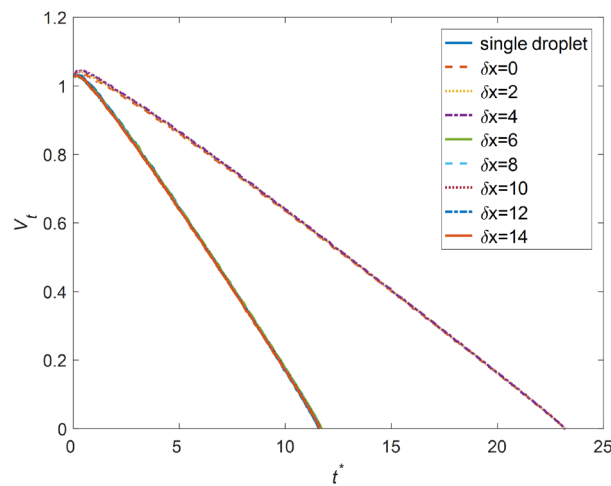


Figure 5. Residual mass variation trend of pair droplets evaporation process with different initial intervals

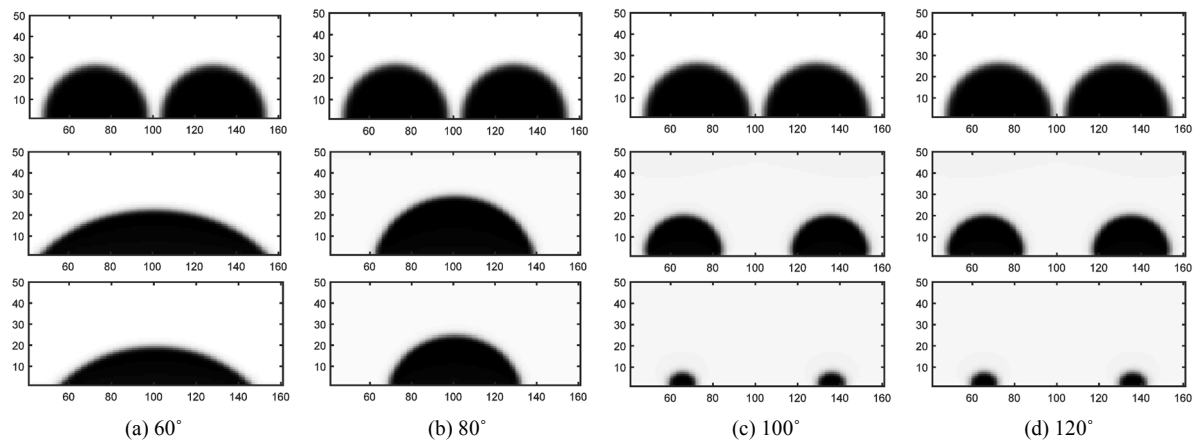
图 5. 不同初始间距条件下双液滴蒸发过程的剩余质量变化趋势图

#### 4.2. 基板润湿性对液滴蒸发过程的影响

本节模拟了不同基板润湿性条件下的双液滴铺展蒸发过程。分别探究静态接触角为  $60^\circ$ 、 $80^\circ$ 、 $100^\circ$  和  $120^\circ$  四种情况。液滴初始间距恒定为 6 个格子，其余参数与上节相同。

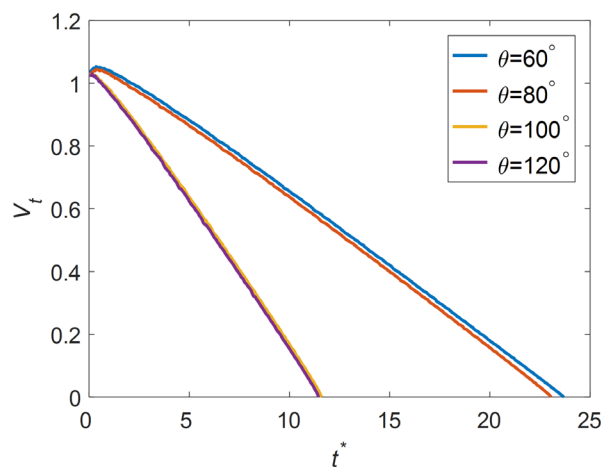
图 6 四种基板润湿性条件下液滴蒸发过程演化图。由图可知，当液滴初始间距恒定为 6 个格子时，且加热基板润湿性为亲水情况时(即接触角为  $60^\circ$  和  $80^\circ$ )，液滴发生合并现象。液滴合并后铺展至界面稳定，蒸发持续进行，液滴接触角基本稳定不变，接触直径不断减小。合并后液滴的蒸发初期，由于液滴表面张力的作用，液滴瞬时接触角略小于静态接触角，随蒸发进行呈恒接触角模式蒸发，直至蒸干。当加热基板润湿性为疏水情况(接触角为  $100^\circ$  和  $120^\circ$ )时，液滴蒸发过程中没有发生合并现象，液滴保持为单液滴进行不对称的蒸发过程。液滴中心侧蒸发较快，液滴中心随蒸发持续进行不断外移， $120^\circ$  接触角时圆心外移更为明显。





**Figure 6.** Diagram of evaporation process evolution with different wettability  
**图 6.** 在不同润湿性条件下双液滴蒸发过程演化趋势图

由于基板润湿性不同，加热基板上液滴剩余质量随特征时间的变化趋势如图 7 所示。由图可知，液滴剩余质量随蒸发时间始终呈线性减小。当基板润湿性为亲水时，液滴发生合并现象，剩余质量减小速度相对较慢，当基板为疏水时，液滴不发生合并，液滴的蒸发时间较短。

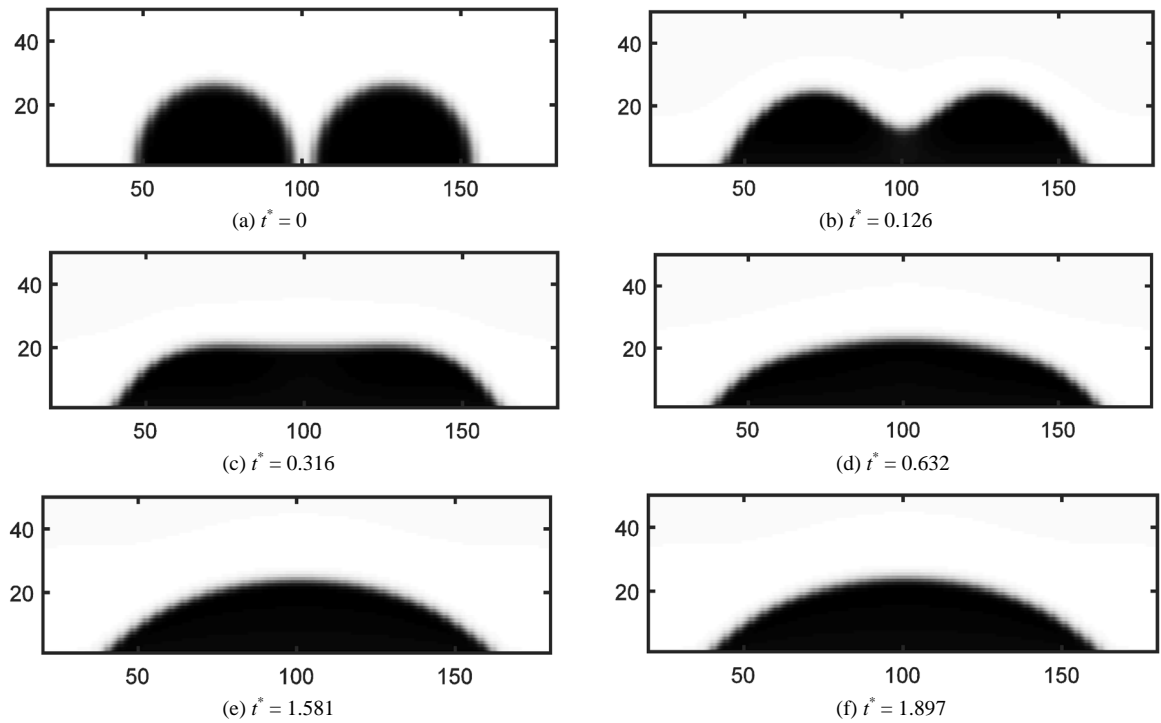


**Figure 7.** Residual mass variation trend of pair droplets evaporation process with different wettability  
**图 7.** 双液滴在不同润湿性条件下蒸发过程的剩余质量变化趋势图

### 4.3. 液滴蒸发过程合并/不合并现象

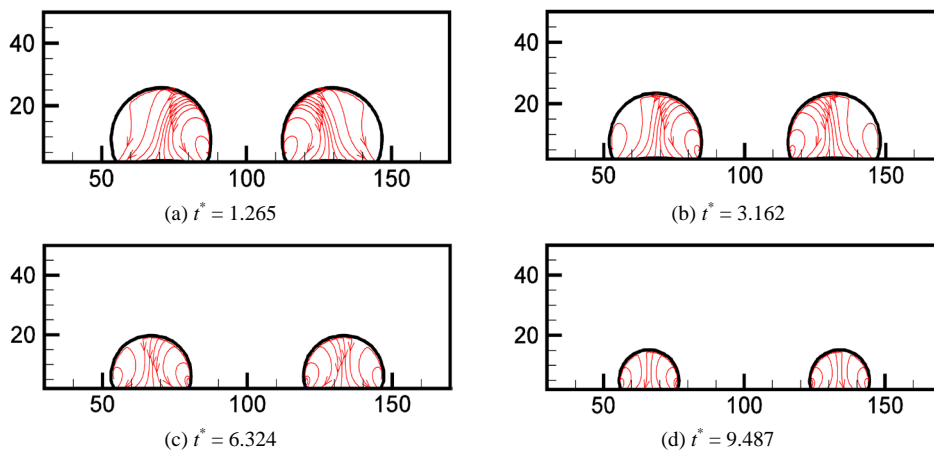
由上文可知，液滴初始放置间距与基板润湿性不同，会造成双液滴在蒸发过程中发生合并或者外迁现象。当基板润湿性条件相同时，液滴间初始放置间距越小，越容易发生合并现象；当液滴间初始放置间距一定时，基板润湿性表现越为亲水，液滴在蒸发过程中越容易发生合并现象。为研究双液滴蒸发过程中发生合并或外迁现象的机理，分别对合并及不合并两种现象进行模拟。

图 8 为基板接触角为  $60^\circ$  时，双液滴在基板上铺展合并的过程。由图可知，液滴自初始放置在基板上之后开始发生铺展，液滴间相互接触后由于液体补充不及时合并产生存在表面凹陷的单液滴。液滴受表面张力作用，稳定后呈球冠状，之后液滴由于基板润湿性的影响，稳定在  $60^\circ$  的接触角后开始蒸发。根据图 6(d) 可知，疏水基板上液滴蒸发过程中没有发生合并，皆呈单液滴形态进行蒸发。蒸发过程中液滴相邻侧接触线收缩较快，同时，液滴中心随蒸发进行不断外迁，直至蒸发完全。



**Figure 8.** The interface changes during the merging phenomenon occurs in the process of evaporation  
**图 8.** 双液滴蒸发过程中发生合并现象时的界面变化

图 9 给出了基板接触角为  $120^\circ$  时，双液滴蒸发过程的流线图。由图可知液滴蒸发过程中，由于相邻液滴间有限空间限制了蒸汽扩散，使得局部蒸汽浓度增加，抑制了两液滴相邻部分的局部蒸发速率，导致液滴面向大空间的一侧蒸发速率大于相邻侧，液滴为了维持球形形态，在内部产生了向蒸发速率较快一侧输运流体的微流动(图 9(a)，图 9(b)，图 9(c))。这种微流动使得液滴中心随蒸发进行不断外迁。随液滴逐渐外迁，液滴间的相互影响减弱，液滴内部流场的不对称性逐渐降低，逐渐接近单液滴蒸发的情况(图 9(d))。



**Figure 9.** Droplet internal flow diagram during pair droplets evaporation  
**图 9.** 双液滴蒸发过程中液滴内部流线图

基板润湿性和液滴初始放置间距对多个液滴在加热基板上蒸发过程的影响较大。由上述分析可知，液滴蒸发过程的主要变化在于是否发生两液滴合并。蒸发过程中存在合并现象时，两液滴合并为一后蒸

发寿命较长，蒸发完成较慢；当蒸发过程中不存在合并现象时，液滴能以单液滴形式各自完成蒸发，蒸发完成所需时间相对较短。因此分别对七种不同基板润湿性条件下，不同液滴初始放置间距时液滴蒸发过程进行了模拟。基板接触角取值为  $60^\circ$ 、 $70^\circ$ 、 $80^\circ$ 、 $90^\circ$ 、 $100^\circ$ 、 $110^\circ$  和  $120^\circ$  七种情况，液滴初始间距设置为 14、12、10、8、6、4、2、0 个格子数。

图 10 给出了不同基板润湿性和不同初始间距时液滴蒸发过程是否发生合并的分布。图中  $\circ$  标记为液滴蒸发过程中出现合并现象的情况， $\blacksquare$  标记为液滴蒸发过程中不出现合并现象的情况。

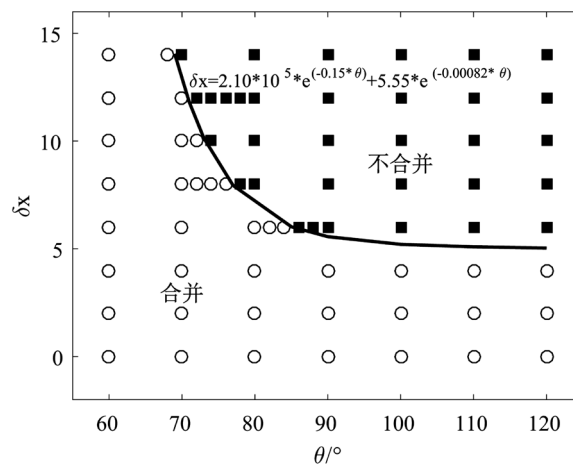


Figure 10. The influence of initial placement distance and contact Angle on droplet mergin  
图 10. 液滴间初始放置间距与接触角对液滴合并现象的影响

通过拟合，可以给出双液滴在不同基板润湿性和不同初始间距时是否发生合并现象的临界线表达式为：

$$\delta x = 2.10 \times 10^5 \times e^{(-0.15\theta)} + 5.55 \times e^{(-0.00082\theta)} \quad (17)$$

## 5. 结论

本文采用 LBM 方法研究了加热基板上双液滴蒸发过程，对比分析了基板润湿性及液滴间距对蒸发过程的影响，得出以下结论：

1) 双液滴蒸发过程中，液滴间初始放置间距明显对液滴蒸发寿命造成影响。基板润湿性不变情况下，当液滴间初始间距小于临界值后，液滴发生合并，呈单液滴形态进行蒸发，其蒸发寿命远比不发生合并现象的液滴蒸发寿命长。

2) 当液滴初始放置间距相同条件下，基板疏水性越强，越不容易出现液滴合并现象。液滴以单液滴形式分别进行蒸发，受液滴间相互作用影响，液滴内部流场呈现不对称形态，导致液滴左右两侧接触线收缩不一致，产生液滴中心外迁现象。

3) 基板润湿性和液滴初始间距是双液滴蒸发过程是否发生合并现象的主要因素，通过大量模拟，获得了利用上述因素判断液滴是否合并的判据。

## 参考文献

- [1] Picknett, R.G. and Bexon, R. (1977) Evaporation of Sessile or Pendant Drops in Still Air. *Journal of Colloid & Interface Science*, **61**, 336-350. [https://doi.org/10.1016/0021-9797\(77\)90396-4](https://doi.org/10.1016/0021-9797(77)90396-4)
- [2] Chau, T.T., Bruckard, W.J., Koh, P.T.L., et al. (2009) A Review of Factors That Affect Contact Angle and Implica-

- tions for Flotation Practice. *Advances in Colloid and Interface Science*, **150**, 106-115. <https://doi.org/10.1016/j.cis.2009.07.003>
- [3] Dash, S. and Garimella, S.V. (2013) Droplet Evaporation Dynamics on a Superhydrophobic Surface with Negligible Hysteresis. *Langmuir*, **29**, 10785-10795. <https://doi.org/10.1021/la402784c>
- [4] Whyman, G. and Bormashenko, E. (2009) Oblate Spheroid Model for Calculation of the Shape and a Contact Angles of Heavy Droplets. *Journal of Colloid and Interface Science*, **331**, 174-177. <https://doi.org/10.1016/j.jcis.2008.11.040>
- [5] 葛瑶, 单彦广. 超疏水表面 SiO<sub>2</sub> 纳米流体液滴蒸发动力学研究[J]. 塑料工业, 2017, 45(5): 107-111.
- [6] 王希志, 单彦广, 饶玲. 超疏水表面液滴蒸发内部流体流动与传热分析[J]. 化学工程, 2017(10): 27-32.
- [7] 金艳艳, 单彦广. 水-乙醇二元混合固着液滴的蒸发特性[J]. 化工学报, 2018, 69(7): 2908-2915.
- [8] Gültekin, A., Erkan, N., Colak, U., *et al.* (2020) PIV Measurement inside Single and Double Droplet Interaction on a Solid Surface. *Experiments in Fluids*, **61**, 218. <https://doi.org/10.1007/s00348-020-03051-0>
- [9] Laghezza, G., Dietrich, E., Yeomans, J.M., *et al.* (2016) Collective and Convective Effects Compete in Patterns of Dissolving Surface Droplets. *Soft Matter*, **12**, 5787-5796. <https://doi.org/10.1039/C6SM00767H>
- [10] Shaikkea, A.J.D. and Basu, S. (2016) Evaporating Sessile Droplet Pair: Insights into Contact Line Motion, Flow Transitions and Emergence of Universal Vaporisation Pattern. *Applied Physics Letters*, **108**, Article ID: 244102. <https://doi.org/10.1063/1.4953836>
- [11] Bansal, L., Hatte, S., Basu, S., *et al.* (2017) Universal Evaporation Dynamics of a Confined Sessile Droplet. *Applied Physics Letters*, **111**, Article ID: 101601. <https://doi.org/10.1063/1.4996986>
- [12] Hatte, S., Dhar, R., Bansal, L., *et al.* (2019) On the Lifetime of Evaporating Confined Sessile Droplets. *Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects*, **560**, 78-83. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2018.10.008>
- [13] Carrier, O., Shahidzadeh-Bonn, N., Zargar, R., *et al.* (2016) Evaporation of Water: Evaporation Rate and Collective Effects. *Journal of Fluid Mechanics*, **798**, 774-786. <https://doi.org/10.1017/jfm.2016.356>
- [14] Shaikkea, A., Basu, S., Hatte, S., *et al.* (2016) Insights into Vapor-Mediated Interactions in a Nanocolloidal Droplet System: Evaporation Dynamics and Affects on Self-Assembly Topologies on Macro- to Microscales. *Langmuir*, **32**, 10334-10343. <https://doi.org/10.1021/acs.langmuir.6b03024>
- [15] Pradhan, T.K. and Panigrahi, P.K. (2015) Deposition Pattern of Interacting Droplets. *Colloids & Surfaces A Physicochemical & Engineering Aspects*, **482**, 562-567. <https://doi.org/10.1016/j.colsurfa.2015.07.013>
- [16] Shan, X. and Chen, H. (1993) Lattice Boltzmann Model for Simulating Flows with Multiple Phases and Components. *Physical Review E*, **47**, 1815-1819. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.47.1815>
- [17] Kang, Q., Zhang, D. and Chen, S. (2002) Displacement of a Two-Dimensional Immiscible Droplet in a Channel. *Physics of Fluids*, **14**, 3203-3214. <https://doi.org/10.1063/1.1499125>
- [18] Latifiyan, N., Farhadzadeh, M., Hanafizadeh, P., *et al.* (2016) Numerical Study of Droplet Evaporation in Contact with Hot Porous Surface Using Lattice Boltzmann Method. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, **71**, 56-74. <https://doi.org/10.1016/j.icheatmasstransfer.2015.12.017>
- [19] Lee, T. and Liu, L. (2010) Lattice Boltzmann Simulations of Micron-Scale Drop Impact on Dry Surfaces. *Journal of Computational Physics*, **229**, 8045-8062. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.07.007>
- [20] Gong, S. and Cheng, P. (2012) Numerical Investigation of Droplet Motion and Coalescence by an Improved Lattice Boltzmann Model for Phase Transitions and Multiphase Flows. *Computers & Fluids*, **55**, 93-104. <https://doi.org/10.1016/j.compfluid.2011.09.013>