arXiv:2305.02537v1 [physics.flu-dyn] 4 May 2023

扩散渗透弥散

Jian Teng, [1] Bhargav Rallabandi, [2] 和 Jesse T. Ault[1], *

[1]布朗大学流体力学中心，美国罗得岛州普罗维登斯 *02912*[2]加州大学河滨分校机械工程系，美国加利福尼亚州河滨市 *92521*

近年来，溶质与表面的相互作用作为一种新颖的控制机制受到广泛关注，它能够驱动独特的流体动力学行为和粒子输运，在生物医学、微流控器件开发以及提高石油采收率等领域具有潜在应用价值。本研究将探讨在存在溶质浓度梯度时，带电壁面附近的扩散渗透运动所引起的弥散。在这里，我们在无背景流动的通道中心引入一团呈高斯分布的盐。随着溶质扩散，浓度梯度驱动壁面产生扩散渗透滑移流，进而在通道内形成回流；反过来，这又推动溶质浓度产生平流通量。这种效应导致溶质发生横向扩散，改变溶质沿通道扩散时的有效扩散率。我们采用多时间尺度分析推导溶质动力学的理论预测，以量化溶质与表面相互作用所驱动的弥散。此外，我们推导了一个截面平均浓度方程，其有效扩散率与泰勒弥散中的有效扩散率类似。最后，我们通过数值模拟验证理论预测。

I. 引言

在流体动力学中，弥散通常用于表示由于非均匀流动条件而导致的物种从高浓度区域向低浓度区域的输运。这不同于扩散，后者表示物种同样从高浓度区域向低浓度区域输运，但其驱动力是布朗运动。由于实际能够以塞状方式输运流体的流动系统相对较少，弥散几乎是各种系统中无处不在的输运机制，这些系统包括微流控器件、过滤系统、化学反应器系统、医疗器械、芯片实验室系统等。弥散的一个经典且简单的例子就是后来被称为泰勒弥散的现象，它最初由 Taylor [41] 研究，随后由阿里斯 [5]进行了推广。泰勒弥散描述了扩散物种在剪切流存在时所经历的增强扩散率，例如管道或通道流动中溶质浓度场的扩散。在这两种情况下，支配溶质输运的对流-扩散方程都可以在横截面上进行平均，从而得到一个描述深度平均浓度的一维模型；该浓度具有增强的有效扩散率，而有效扩散率是控制输运的 Pecl´et 数的函数。通过假设某种溶质的浓度具有阶跃初始条件，可以简单地理解这种泰勒弥散现象。举例来说，假设管道中存在泊肃叶流，并且我们突然向系统中加入溶质，使得 $c(x < 0) = c_1$ 以及 $c(x >= 0) = c_2$，其中 $-\infty < x < \infty$ 是无限长管道的轴向坐标。那么，在没有背景流动的极限情况下，两种溶质浓度之间的界面将通过扩散而变得模糊，这完全是一个一维过程。然而，随着流体平流相对于溶质扩散的重要性（即 Pecl´et 数）增加，系统中的剪切流会在两种溶质浓度扩散的同时使其界面发生变形，从而引入横向扩散，并提高横截面平均浓度的轴向扩散速率。关于泰勒弥散现象的更严格背景介绍，请参阅：（1）Barton [8]，他将阿里斯 [5] 的方法和结果推广到所有时间，而不仅仅是渐近行为；（2）Frankel 和 Brenner [18]，他们提出了广义泰勒弥散理论，将 Taylor 和 Aris 的思想大幅扩展到整类其他问题，例如多孔介质流动，甚至沉降颗粒问题；以及（3）Brenner 和 Edwards [12]，他们对宏观输运过程理论进行了全面概述。

Taylor 和 Aris 关于泰勒弥散的理论研究为许多其他研究和应用奠定了基础。这里仅简要介绍几个例子。St one 和 Brenner [40]扩展了泰勒弥散理论，将流向速度变化的层流纳入考量。Aminian 等人 [3] 研究了通道边界形状和纵横比对弥散的影响，以此作为控制微流体学中化学物质输送的手段。Salmon 和 Doumenc [31] 研究了浮力驱动流引起的溶质弥散，并发展出与泰勒弥散类似的解析方法。Chu 等人 [14] 将平行板通道流中的振荡压差驱动流以及图案化滑移壁面的概念纳入研究，并考察了这两种效应对弥散过程的影响。最后，Chu 等人 [15] 将管流中的泰勒弥散与一种物质的输运耦合起来，该物质是

* jesse_ault@brown.edu

通过扩散泳输运的颗粒或细菌构成的第二种组分；Migacz 和 Ault 也对此进行了研究[26]。这份列表并非详尽无遗，但许多与弥散相关的研究有一个共同主题：外加压力梯度或运动边界驱动剪切流，而剪切流会导致弥散。通常，溶质的输运是被动的，也就是说，人们认为它不会与背景流体动力学耦合并改变后者。然而，在许多情况下，溶质输运会与流体动力学完全耦合，这正是本文关注的重点。具体而言，我们考虑这样一种情况：不存在背景压差驱动流，也没有运动边界，但溶质会与系统边界相互作用，通过扩散渗透驱动流体流动。扩散渗透是指存在溶质浓度梯度时，流体在表面附近自发运动。

扩散渗透的物理起源由德约金等人发现。 [16], 德约金及其同事通过实验表明，边界附近的局部溶质浓度梯度能够在表面诱导滑移流边界条件。此后，人们在理解和建模这一效应方面取得了显著的理论进展；在弥散研究中，多项研究也已证明，扩散渗透有可能改变受限几何中悬浮物种的输运。 [7, 13, 22, 23, 30, 33, 35]扩散渗透还与一种类似现象——扩散泳——密切相关。扩散渗透指化学浓度梯度存在时紧邻表面的流体运动，而扩散泳则指浓度梯度中悬浮颗粒的反向运动，这种运动是由表面滑移流引起的。扩散渗透与扩散泳都可能包含化学渗透／泳的贡献，这类贡献源于表面上的渗透压梯度；也可能包含电渗／泳的贡献，这类贡献出现在阴离子和阳离子扩散率不匹配的电解质溶质体系中。 [4]近年来，耦合扩散渗透与扩散泳已成为多项研究的主题，尤其是受限几何中溶质与胶体颗粒的耦合传输；在这类几何构型中，对流输运难以实现。 [1, 13, 22, 34, 37, 38, 42]

这类耦合运动也一直是多种其他自然和工程场景研究的重点，例如地下多孔介质流 [29], 水过滤系统 [10, 17, 24, 35], 微流控器件 [28, 36], 织物清洁系统 [37], 颗粒递送方法 [6], 储能应用 [19, 21], 等等。通常，在这类研究中，扩散渗透的作用只是次要影响，或完全被忽略；不过，也有一些研究探讨了溶质和颗粒在狭窄孔隙中的运动，并同时考虑了这两种效应 [1, 2, 6, 34, 38, 42]。在这类系统中，扩散渗透对于溶质、流体以及任何悬浮颗粒的输运都可能发挥关键作用 [32]。本研究考察通道中的溶质弥散，其中唯一的流体运动由通道壁处的扩散渗透驱动。也就是说，初始溶质浓度的扩散会在壁面处形成局部浓度梯度，进而通过扩散渗透驱动流体再循环。由此产生的剪切流又会通过一种类似于泰勒弥散的机制，改变溶质浓度的输运。

如前所述，已有多项研究探讨了泰勒弥散与扩散泳之间的耦合。具体而言，Chu 等人 [15] 研究了带电胶体颗粒或细菌在经历泰勒弥散的溶质浓度场中的扩散泳动力学。这项工作考虑的是单向耦合：流体流动驱动溶质场和颗粒浓度场发生泰勒弥散，而颗粒则通过溶质场受到扩散泳带来的额外运动贡献。他们采用了与 Taylor 和 Aris 类似的方法，得出了长时间区间内的理论解和数值解。近期，Migacz 和 Ault [26]在此基础上进一步推导出适用于早期和长时间区间的解。然而，这两项研究都未考虑通道壁处的扩散渗透。Alessio 等人 [2], 的研究则考虑了这些效应：他们纳入扩散渗透滑移边界条件，并推导出类似于泰勒的、描述溶质向盲端孔道内输运的多维有效弥散方程。与先前的研究不同，尽管 Alessio 的工作中速度分布仍近似呈抛物线型（如经典泰勒弥散中的情况），但其大小会随溶质浓度的演化而成为通道内位置和时间的函数。我们将在自己的系统中发现类似的行为。

据我们所知，此前尚无理论解用于描述扩散渗透驱动的泰勒弥散类似现象。本研究借鉴了 Alessio 等人 [2], Chu 等人[15], 以及 Migacz 和 Ault [26] 的研究，推导出溶质塞在通道中发生扩散渗透驱动弥散的解析解。我们考虑一个溶质塞，其初始分布呈高斯峰形，并位于通道中心（见图 1）。随着溶质扩散，壁面处的局部浓度梯度会通过扩散渗透产生有效滑移边界条件，该条件取决于表面电荷。壁面处的滑移会驱动通道内的回流。回流会促进溶质输运的平流并引入横向扩散，从而改变溶质沿通道方向的有效扩散率。在建模过程中，我们采用摄动法推导流体与溶质动力学耦合问题的解析解。我们分别研究长而窄的二维通道中的输运（采用二维笛卡尔坐标系），以及长而窄的圆柱管中的输运（采用二维轴对称圆柱坐标系）。在 § II中，我们介绍这两个系统的控制方程和边界条件。随后，我们结合多重时间尺度分析，采用摄动法求解

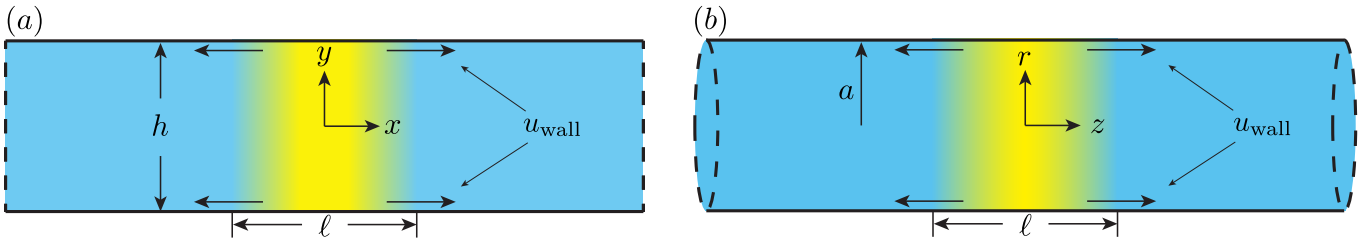

图 1. 问题设置。我们考虑一个初始呈高斯分布的盐塞，其特征长度为 l，分别采用 (a) 二维笛卡尔坐标和 (b) 轴对称圆柱坐标进行描述。两个通道在轴向上均为无限长，而$u_{\text{壁面}}$ 表示由扩散渗透引起的壁面滑移速度。

流体与溶质动力学的理论解。在 § IID中，我们类比泰勒弥散，推导截面平均溶质浓度的有效扩散率。在§ III中，我们通过数值模拟求解流体与溶质动力学，并展示数值结果与理论预测吻合良好。在 § IV中，我们分析不同条件和不同时间阶段下的弥散行为。

II. 狭窄通道中扩散渗透弥散的建模

本节对扩散渗透驱动再循环存在时，通道中扩散的溶质塞所涉及的流体与溶质输运耦合过程进行建模。我们考虑对应于平面通道和圆柱形通道的两种构型，并分别使用笛卡尔坐标和圆柱坐标描述这两种构型中的流动。两种系统的通道构型如图所示1。初始时，我们引入一个以原点为中心、服从高斯分布的溶质塞。当溶质分子/离子不与通道壁相互作用时，溶质输运的动力学由简单的布朗扩散支配。然而，此处我们考虑通道壁具有非零表面电荷，且不能忽略溶质与表面的相互作用的情况。通道壁处的局部溶质浓度梯度会产生扩散渗透滑移速度边界条件，进而在溶质扩散时驱动通道内的再循环。该滑移速度边界条件的大小为 $u_{\text{wall}} = \Gamma_w \nabla_{\parallel} \ln c$，其中 u_{wall} 是沿平行于壁面方向的壁面速度，梯度沿平行于表面的方向计算。这里，Γ_w 是扩散渗透迁移率系数，它是通道壁表面电荷的函数，而 c 是溶质离子浓度。

A. 控制方程

系统中的流体与溶质动力学由耦合的连续性方程、不可压缩 Navier-Stokes 方程以及描述溶质输运的对流-扩散方程共同控制。这里，流体的压力、密度、黏度和速度分别表示为 p, ρ, μ 和 $\boldsymbol{u} = (u, v)$ 或 (u_r, u_z)。溶质浓度和扩散率分别表示为 $c(x, y, t)$ 和 D_s。这里，我们考虑 $Re = \frac{\rho U h}{\mu} \ll 1$，其中 U 是轴向的某个特征流速；我们忽略重力的影响，并将流体动力学视为准稳态。控制方程的有量纲形式为

$$\nabla^* \cdot \boldsymbol{u}^* = 0, \tag{1a}$$

$$-\nabla^* p^* + \mu \nabla^{*2} \boldsymbol{u}^* = \boldsymbol{0}, \tag{1b}$$

$$\frac{\partial c^*}{\partial t^*} + \nabla^* \cdot (\boldsymbol{u}^* c^*) = D_s \nabla^{*2} c^*, \tag{1c}$$

其中星号表示有量纲量。二维轴对称圆柱情形和二维笛卡尔情形可以采用类似的方法求解，并具有类似的边界条件。为简便起见，正文中我们仅展示二维通道流情形的推导，并请读者参阅附录 B ，其中给出了管流情形的推导。狭长通道在笛卡尔坐标系中的高度为 h。通道无限延伸，初始高斯溶质分布具有特征宽度l，我们将寻求在以下极限条件下的解

$h \ll l$。首先，我们将方程组无量纲化如下，

$$x = \frac{x^*}{\ell},\ y = \frac{y^*}{h},\ u = \frac{u^*}{U},\ v = \frac{v^*\ell}{Uh},\ p = \frac{p^*h^2}{\mu U\ell},\ \epsilon = \frac{h}{\ell},\ U = \frac{D_s}{\ell},\ t = \frac{t^*}{\ell^2/D_s}, \tag{2}$$

其中 $U = D_s/l$ 是溶质沿通道扩散的特征速度，而l^2/D_s 是溶质沿通道扩散的特征时间。采用这些标度，我们可以将控制方程（1）改写为无量纲形式：

$$0 = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y}, \tag{3a}$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial x} + \epsilon^2\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2}, \tag{3b}$$

$$0 = -\frac{\partial p}{\partial y} + \epsilon^4\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \epsilon^2\frac{\partial^2 v}{\partial y^2}, \tag{3c}$$

$$\epsilon^2\frac{\partial c}{\partial t} + \epsilon^2 u\frac{\partial c}{\partial x} + \epsilon^2 v\frac{\partial c}{\partial y} = \epsilon^2\frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c}{\partial y^2}. \tag{3d}$$

控制方程（3）的解需满足流体和溶质的边界条件。这些边界条件可概括如下：

$$\text{Quiescent far-field condition: } p = 0,\quad u = 0,\quad c = 0 \quad \text{at} \quad x = \pm\infty, \tag{4}$$

$$\text{No fluid penetration at the walls: } v = 0 \text{ at } y = \pm\frac{1}{2}, \tag{5}$$

$$\text{No-flux conditions at the channel walls: } \frac{\partial c}{\partial y} = 0 \text{ at } y = \pm\frac{1}{2}, \tag{6}$$

$$\text{Diffusioosmotic wall slip boundary condition: } u = \frac{\Gamma_w}{D_s}\frac{\partial \ln c}{\partial x} \text{ at } y = \pm\frac{1}{2}. \tag{7}$$

式（7）给出的滑移边界条件由扩散渗透引起，从而驱动通道内的流动。在本研究中，我们假设ζ电位和扩散渗透迁移率系数 Γ_w为常数。为获得最终的解析解，需要作出这一假设；正如近期多项研究所讨论的，在许多情况下这也是合理的近似（例如，Ault等人 [6], Migacz 和 Ault [26], Lee等人 [25], Gupta等人[20], 以及Alessio 等人 [2]）。此外，我们重点研究初始条件相对于通道宽度已充分展开的情况，即 $\epsilon \ll 1$，此时可使用润滑近似来简化控制方程。

B. 流体力学的主导阶

在上述最初的无量纲化中，我们选择了通道l^2/D_s方向上溶质扩散的特征时间作为特征时间尺度。这对应于系统的慢动力学。系统中的另一个重要时间尺度是溶质沿通道横向扩散的特征时间h^2/D_s。这对应于系统的快动力学，两个时间尺度相差 $\epsilon^2 = h^2/l^2 \ll 1$倍。在此，为了得到一个在早期和后期动力学阶段均一致有效的解，我们采用了类似于 Migacz 和 Ault [26]的方法。

沿用这一方法，我们引入多重时间尺度分析 [9] ，其中引入了快时间变量$T = t/\epsilon^2$。也就是说， $T = O$在量纲时间 $\sim h^2/D_s$上对应于 $t = O(\epsilon^2)$，而 $t = O$在量纲时间 $\sim l^2/D_s$上对应于 $t = O(1)$。因此，我们可以将任何时变量映射为

$$f(t) \mapsto f(t,T) \Rightarrow \frac{\partial f}{\partial t} \mapsto \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\partial T}{\partial t}\frac{\partial f}{\partial T} = \frac{\partial f}{\partial t} + \epsilon^{-2}\frac{\partial f}{\partial T}. \tag{8}$$

通过这一映射，对流-扩散方程（3*d*）变为

$$\epsilon^2\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{\partial c}{\partial T}+\epsilon^2 u\frac{\partial c}{\partial x}+\epsilon^2 v\frac{\partial c}{\partial y}=\epsilon^2\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}. \tag{9}$$

我们寻求控制方程在小参数 ϵ^2 下、当 $Re \ll 1$ 时的摄动展开形式解析解。我们寻求如下形式的解

$$c(x,y,t,T)=c_0(x,y,t,T)+\epsilon^2 c_1(x,y,t,T)+\epsilon^4 c_2(x,y,t,T)+\ldots, \tag{10a}$$
$$p(x,y,t,T)=p_0(x,y,t,T)+\epsilon^2 p_1(x,y,t,T)+\epsilon^4 p_2(x,y,t,T)+\ldots, \tag{10b}$$
$$u(x,y,t,T)=u_0(x,y,t,T)+\epsilon^2 u_1(x,y,t,T)+\epsilon^4 u_2(x,y,t,T)+\ldots, \tag{10c}$$
$$v(x,y,t,T)=v_0(x,y,t,T)+\epsilon^2 v_1(x,y,t,T)+\epsilon^4 v_2(x,y,t,T)+\ldots. \tag{10d}$$

溶质浓度的初始条件为 $c(t=T=0)=\exp(-x^2)$。首先，我们需要求得主导阶速度和压力解。将方程（10）代入方程（3），即可得到这些解：

$$0=\frac{\partial^2 u_0}{\partial y^2}+\frac{\partial p_0}{\partial x}, \tag{11a}$$
$$\frac{\partial p_0}{\partial y}=0, \tag{11b}$$
$$\frac{\partial u_0}{\partial x}+\frac{\partial v_0}{\partial y}=0, \tag{11c}$$
$$\frac{\partial c_0}{\partial T}=\frac{\partial^2 c_0}{\partial y^2}, \tag{11d}$$

在主导阶下。考虑初始条件以及通道壁处的无通量条件，即 $\frac{\partial c_0}{\partial y}(y=\pm 1/2)=0$，必有 $c_0(x,y,t,T)=c_0(x,t)$，其中 $c_0(t=0)=\exp(-x^2)$。此外，方程（11*b*）表明，p_0 仅是 x 和 t 的函数。

为求得主导阶速度，我们首先取方程（11*a*），并求解 u_0，其满足滑移边界条件（7）。由此得到

$$u_0=\frac{\Gamma_w}{D_s c_0}\frac{\partial c_0}{\partial x}+\frac{1}{8}(-1+4y^2)\frac{\partial p_0}{\partial x}. \tag{12}$$

此处，u_0 包含一项，其中含有 $p_0(x,\ t)$，可通过考虑质量守恒并对通道横截面 A进行积分求得，即

$$\frac{1}{A}\iint_A u_0\,dA=0. \tag{13}$$

按照这一方法，$p_0(x,\ t)$，可得为

$$p_0(x,t)=\frac{12\Gamma_w}{D_s}\ln c_0. \tag{14}$$

利用这一结果，u_0 可以简化并写为

$$u_0(x,y,t)=\frac{\Gamma_w}{2D_s}\frac{\partial \ln c_0}{\partial x}(-1+12y^2). \tag{15}$$

为求解 $v_0(x,\ y,\ t)$，我们对连续性方程（11*c*）进行积分，并应用由（5）给出的边界条件。这得到 y分量的最低阶速度为

$$v_0(x,y,t)=\frac{\Gamma_w}{2D_s}\frac{\partial^2 \ln c_0}{\partial x^2}(1-4y^2)y. \tag{16}$$

如前所述 d，圆柱管中流动的等效结果可见附录 B。

C. 高阶溶质输运

高阶溶质浓度源于扩散渗透，它导致了偏离纯扩散的现象。利用上文求得的主阶速度剖面，我们尝试从（3*d*）求解高阶溶质动力学。将渐近展开代入对流-扩散方程（9），可得其主阶结果：

$$\frac{\partial c_1}{\partial T}+\frac{\partial c_0}{\partial t}+u_0\frac{\partial c_0}{\partial x}=\frac{\partial^2 c_0}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2}. \tag{17}$$

涉及 v 的项已消失，因为 $\frac{\partial c_0}{\partial y}=0$。为求解此问题，我们首先考虑足够长的时间，使得 $T\gg 1$，但 t 有限。在此极限下，$\frac{\partial c_1}{\partial T}$ 很小。然后，对方程（17）沿通道横截面取平均，得到

$$\frac{\partial c_0}{\partial t}=\frac{\partial^2 c_0}{\partial x^2}. \tag{18}$$

此问题的解为

$$c_0(x,t)=\frac{1}{\sqrt{1+4t}}\exp\left(-\frac{x^2}{1+4t}\right), \tag{19}$$

此前已 由 [20] 提出。随后可将对流-扩散方程（17）简化为 to

$$\frac{\partial c_1}{\partial T}+\frac{\Gamma_w}{2D_s}\frac{\partial \ln c_0}{\partial x}(-1+12y^2)\frac{\partial c_0}{\partial x}=\frac{\partial^2 c_1}{\partial y^2}, \tag{20}$$

满足初始条件 $c_1(t=T=0)=0$。为求解该方程，我们注意到，在长时间下，快时间动力学应已完全衰减，因此可以忽略时间导数项；对方程积分可得

$$c_1(T\to\infty)\sim c_1^{\infty}(x,y,t)=\frac{y^2}{4c_0}\frac{\Gamma_w}{Ds}(-1+2y^2)\left(\frac{\partial c_0}{\partial x}\right)^2+B(x,t) \tag{21}$$

其中 $B(x,\ t)$ 是积分后得到的一个尚未知函数。为了求解 $B(x,\ t)$，我们将（21）代入（9），并对方程取横截面平均，得到

$$\frac{\partial^2 B}{\partial x^2}=\frac{\Gamma_w}{D_s}\frac{e^{-\frac{x^2}{1+4t}}}{420(1+4t)^{9/2}}\left[49(1+4t)^2+48\frac{\Gamma_w}{D_s}(1+4t)x^2-32\frac{\Gamma_w}{D_s}x^4\right]+\frac{\partial B}{\partial t}. \tag{22}$$

请注意，到目前为止，我们的结果都保留为一般形式 c_0，但在此处以及下文求解 B 时，我们代入了上文给出的 c_0 特定解，因为使用傅里叶变换方法求解方程（22）需要该解。必要时，可以对其他任意初始条件重复这一过程。使用傅里叶变换方法，$B(x,\ t)$ 可求得

$$B=\frac{\Gamma_w}{D_s}\frac{e^{-\frac{x^2}{\alpha}}}{840\alpha^{9/2}}\left(49(\alpha x)^2+16\frac{\Gamma_w}{D_s}t\left(3\alpha^2-12\alpha x^2+4x^4\right)-12\frac{\Gamma_w}{D_s}\alpha^2(\alpha-2x^2)\ln(\alpha)\right), \tag{23}$$

其中 $\alpha(t)=1+4t$。请注意，c_1^{∞}仅取决于慢时间 t，而不取决于快时间 T。它不满足初始条件，因此还不是高阶溶质动力学的完整解。我们寻求如下形式的解：$c_1(x,y,t,T)=c_1^{\infty}(x,y,t)+\hat{c}_1(x,y,t,T)$。代入方程（20），得到

$$\frac{\partial \hat{c}_1}{\partial T}=\frac{\partial^2 \hat{c}_1}{\partial y^2},\qquad \text{with the initial condition}\quad \hat{c}_1(T=0)=-c_1^{\infty}(t=0), \tag{24}$$

其解为的是

$$\hat{c}_1=\frac{\Gamma_w}{4c_0D_s}\left(\frac{\partial c_0}{\partial x}\right)^2\Bigg|_{t=0}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{6(-1)^n}{n^4\pi^4}e^{-(2n\pi)^2T}\cos 2n\pi y. \tag{25}$$

随后，我们可以构造一个复合解 $c_1 = c_1^{\infty} + \hat{c}_1$，该解对所有 t 均有效。通过考虑以下情况，可以验证 c_1 的解满足质量守恒。

$$\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-1/2}^{1/2} c_1(x, y, t, T) \mathrm{d}y \, \mathrm{d}x = 0. \tag{26}$$

再一次，得到类似的结果　　圆柱管几何中耦合动力学的相关内容可见附录 B。

D. 有效扩散系数

如前所述，通道壁上的扩散渗透滑移流会诱发回流，进而驱动溶质平流输运，并改变溶质沿通道扩散时的有效扩散率。本文通过推导横截面平均溶质输运的一维输运方程，来表征该输运的有效扩散率。这种方法类似于泰勒 [41] 和阿里斯 [5] 在其关于压力驱动剪切流中溶质弥散的著名研究中采用的方法（另见例如 Alessio 等人 [2], 、Aminian 等人 [3]）。

首先，我们将 $c'(x, y, t)$ 定义为溶质浓度相对于其横截面平均值 $\overline{c}(x, y, t)$ 的偏差，其中上横线表示对横截面取平均，

$$c'(x, y, t) = c(x, y, t) - \overline{c(x, t)}. \tag{27}$$

将此定义代入溶质对流-扩散方程，得到

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \frac{\partial c'}{\partial t} + u\frac{\partial c'}{\partial x} + u\frac{\partial \overline{c}}{\partial x} + v\frac{\partial c'}{\partial y} = \frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c'}{\partial x^2} + \frac{1}{\epsilon^2}\frac{\partial^2 c'}{\partial y^2}. \tag{28}$$

接下来，对此方程沿横截面取平均，得到

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \overline{u\frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{v\frac{\partial c'}{\partial y}} = \frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial x^2}. \tag{29}$$

在此，将上文求得的 u 和 v 代入后，可将其改写为一个具有已知强迫项的一维扩散方程，形式如下

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left[\left(\frac{\Gamma_w}{D_s}\right)^2 \frac{\epsilon^2}{210}\left(\frac{\partial}{\partial x}\ln c_0\right)^2 \frac{\partial c_0}{\partial x}\right] = \frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial x^2}. \tag{30}$$

该方程很容易通过数值方法求解。为了类比经典的泰勒弥散问题，注意到 $\frac{\partial c_0}{\partial x} - \frac{\partial c}{\partial x} = \mathrm{O}(\epsilon^2)$，可将其改写为一维纯扩散问题，得到

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{\mathrm{eff}}\frac{\partial \overline{c}}{\partial x}\right), \tag{31}$$

其中，有效扩散率 D_{eff} 为

$$D_{\mathrm{eff}} = 1 + \left(\frac{\Gamma_w}{D_s}\right)^2 \frac{\epsilon^2}{210}\left(\frac{\partial}{\partial x}\ln c_0\right)^2 + O(\epsilon^4). \tag{32}$$

由方程（32）可知，在主导阶下，无量纲有效扩散率为 $D_{\mathrm{eff}} = 1$，而扩散渗透对弥散的影响为 $O(\epsilon^2)$。也就是说，随着 $\epsilon \to 0$，溶质塞的初始条件变得更加弥散，浓度梯度减弱，扩散渗透也变得可以忽略。随着溶质在长时间内扩散开来，$t \to \infty$ 时也会出现相同的行为。值得注意的是，扩散渗透的贡献也为$O((\Gamma_w/D_s)^2)$。因此，尽管扩散渗透边界条件具有非线性，将 Γ_w的符号反转（从而改变再循环方向），仍会得到相同的有效扩散率。下文将通过可视化结果看到，迁移率符号反转时，溶质浓度相对于 c_0 的偏差并非彼此的镜像，这会让这一结果显得更加令人惊讶。

遵循类似的方法，　　h，并利用附录B中的结果，可得类似的平均输运方程

圆柱管情况下的方程为

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left[\left(\frac{\Gamma_w}{D_s}\right)^2 \frac{\epsilon^2}{48}\left(\frac{\partial}{\partial z}\ln c_0\right)^2 \frac{\partial c_0}{\partial z}\right] = \frac{\partial^2 \overline{c}}{\partial z^2}. \tag{33}$$

这也可以写成类似于泰勒弥散的形式，即

$$\frac{\partial \overline{c}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z}\left(D_{\text{eff}}\frac{\partial \overline{c}}{\partial z}\right), \tag{34}$$

其中，有效扩散率 D_{eff} 在主导阶近似下为

$$D_{\text{eff}} = 1 + \left(\frac{\Gamma_w}{D_s}\right)^2 \frac{\epsilon^2}{48}\left(\frac{\partial}{\partial z}\ln c_0\right)^2 + O(\epsilon^4). \tag{35}$$

需要注意的是，在二维通道流中，扩散渗透对有效扩散率的贡献比圆柱管系统中弱 48/210 倍。这是因为，对于给定的壁面滑移速度，圆柱管中的中心线速度必须大于二维通道流中的中心线速度，从而产生更大的速度梯度，使溶质分布发生更显著的畸变，并对有效扩散率的增强产生更大的贡献。利用这些有效扩散率以及一维扩散方程，可以相当高效地通过数值方法计算截面平均溶质浓度的演化过程。

III. 数值方法

为了验证上述理论结果，我们对两种几何构型中的耦合传输进行了数值模拟。在本节中，我们将介绍所采用的数值方法，并展示上述理论结果与数值结果高度吻合。对于二维通道流情况，采用傅里叶变换方法求解速度分布；对于圆柱管流情况，则采用多重网格松弛方法求解。由于我们研究的是低雷诺数区间，且流体动力学可以视为准稳态，因此数值方法可概述如下。首先，将溶质浓度初始化为前文所述的高斯分布。随后，采用数值多重网格松弛方法或理论傅里叶变换方法求解准稳态速度分布。接下来，利用确定的速度剖面，通过对控制对流-扩散方程进行数值求解，更新溶质浓度分布。然后重复这一过程，直至达到最终时间。

A. 速度求解器

对于不可压缩牛顿斯托克斯流，控制方程可简化为关于流函数的双调和方程，ψ其形式为

$$\nabla^4 \psi = 0. \tag{36}$$

这种表述方式很方便，因为无需求解压力即可获得速度剖面。在笛卡尔坐标系中，可以采用傅里叶变换方法大幅加快该方程的数值解求解。具体而言，可以沿 x方向对双调和方程进行傅里叶变换，得到

$$k^4\hat{\psi}(k,y) - 2k^2\frac{\partial^2\hat{\psi}(k,y)}{\partial y^2} + \frac{\partial^4\hat{\psi}(k,y)}{\partial y^4} = 0. \tag{37}$$

这里，由于速度可视为准稳态，我们忽略 ψ 对时间的函数依赖。(37) 的边界条件为 $\hat{\psi}(k,0) = 0$, $\frac{\partial^2 \hat{\psi}}{\partial y^2}\big|_{y=0} = 0$, $\hat{\psi}(k,\pm 1/2) = 0$, 和 $\frac{\partial \hat{\psi}}{\partial y}\big|_{y=\pm 1/2} = \hat{u}_{\text{wall}}$。这里，$\hat{u}_{\text{wall}}$ 可以通过在 MATLAB 中使用快速傅里叶变换 `fft()` 求得，而 ψ 可以通过逆傅里叶变换求得。

使用 `ifft()` 对 $\hat{\psi}$ 进行变换。最后，可以直接使用 ψ 得到速度分量。

$$u = \frac{\partial \psi}{\partial y}, \qquad v = -\frac{\partial \psi}{\partial x}. \tag{38}$$

对于圆柱坐标下的情形，我们尚未找到类似的方法，能够利用傅里叶变换快速求解双调和方程，因此改用一组耦合泊松方程的多重网格解法直接求解，然后使用直接有限差分法求解速度。具体而言，双调和方程可写为如下形式。

$$D^2\psi = r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \phi, \tag{39a}$$

$$D^2\phi = r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial \phi}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0, \tag{39b}$$

其中 D^2 是圆柱坐标中的一种特殊算子，适用于双调和方程，其表达式为$D^2 = r\frac{\partial}{\partial r}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ [11, 39]。壁面满足边界条件 $\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} = u_{\text{wall}}$ 和 $\phi = -\frac{1}{r}\frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2}$。由于对称条件以及通道末端的无通量条件，其他所有边界均满足 $\psi = 0$ 和 $\phi = 0$。

这组耦合泊松方程采用高斯-赛德尔松弛法求解，控制方程和边界条件在空间和时间上均达到二阶精度。如前所述，采用多重网格方法快速加速了这一迭代方法的收敛。

B. 浓度求解器

溶质浓度分布可通过对流-扩散方程进行数值求解。我们采用有限差分结合近似因式分解法，求解两种几何构型[27]下的对流-扩散方程。适用于近似因式分解法的笛卡尔坐标系和圆柱坐标系下的半离散控制方程分别为

$$\begin{aligned}\left[I - \frac{D_s\Delta t}{2}\delta_{xx}\right]\left[I - \frac{D_s\Delta t}{2}\delta_{yy}\right]c^{n+1} = &-\frac{\Delta t}{2}\left(3u^n\frac{\partial c^n}{\partial x} + u^{n-1}\frac{\partial c^{n-1}}{\partial x}\right)\\ &-\frac{\Delta t}{2}\left(3v^n\frac{\partial c^n}{\partial y} + v^{n-1}\frac{\partial c^{n-1}}{\partial y}\right) + \left[I + \frac{D_s\Delta t}{2}\delta_{xx}\right]\left[I + \frac{D_s\Delta t}{2}\delta_{yy}\right]c^n,\end{aligned} \tag{40}$$

and

$$\begin{aligned}\left[I - \frac{D_s\Delta t}{2}\left(\delta_{rr} + \frac{1}{r}\delta_r\right)\right]\left[I - \frac{D_s\Delta t}{2}\delta_{zz}\right]c^{n+1} = &-\frac{\Delta t}{2}\left(3u_r^n\frac{\partial c^n}{\partial r} - u_r^{n-1}\frac{\partial c^{n-1}}{\partial r}\right)\\ &-\frac{\Delta t}{2}\left(3u_z^n\frac{\partial c^n}{\partial z} - u_z^{n-1}\frac{\partial c^{n-1}}{\partial z}\right) + \left[I + \frac{D_s\Delta t}{2}\left(\delta_{rr} + \frac{1}{r}\delta_r\right)\right]\left[I + \frac{D_s\Delta t}{2}\delta_{zz}\right]c^n,\end{aligned} \tag{41}$$

其中 Δt 是时间步长，n 表示当前时间索引，I 表示单位矩阵，而 δ_{xx}等是空间导数矩阵。这里，扩散项采用隐式二阶精度时间推进，对流项采用二阶亚当斯-巴什福思法。对于柱坐标情形，空间导数采用二阶有限差分，而对于笛卡尔情形，空间导数采用四阶有限差分。为启动模拟，我们首先使用一阶欧拉法，通过一系列非常小的时间步长计算对流项。对于每个时间步长，通过求解方程（40）或（41）来更新溶质浓度分布随时间的变化，然后按照上述方法重新计算流体速度，以供下一时间步长使用。请注意，在所有情形中，我们都会添加一个较小的背景浓度偏移量 10^{-7}，以避免 [20] 所述的所谓“弹道运动”。该偏移量代表溶液中通常因溶解的 CO_2 或其他因素而存在的背景离子浓度。本节中，我们介绍并阐述了用于这两种系统的数值方法。下一节将通过数值验证，探讨这类系统的结果范围及其物理演化，并展示截面平均方法可很好地近似完整二维模拟的结果，还能像泰勒弥散情形那样大幅简化分析。

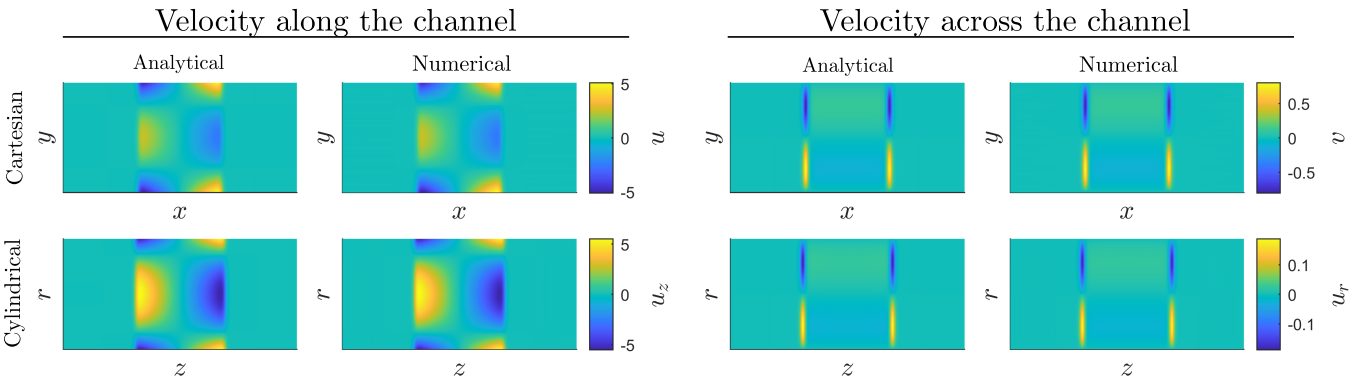

图 2. 两种坐标系下数值速度预测与理论速度预测的比较。回流速度源于通道壁处的扩散渗透运动，该运动分别由笛卡尔坐标系和圆柱坐标系下的 $u_{\text{壁面}} = \frac{\Gamma_w}{D_s}\frac{\partial}{\partial x}\ln c$ 或 $u_{\text{壁面}} = \frac{\Gamma_w}{D_s}\frac{\partial}{\partial z}\ln c$ 滑移边界条件驱动。结果是在 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 0.1$ 条件下，于 $t = 0.2$ 处计算得到的。

IV. 结果

首先，我们使用数值模拟验证理论预测。图2展示了数值结果与理论结果的比较示例。平行板通道中的速度解析预测通过方程（15）和（16）计算，圆柱通道中的速度则由（B13）和（B14）计算。比较结果对应于 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 0.1$，取值为 $t = 0.2$。扩散渗透迁移率为负时，壁面滑移速度背离溶质浓度峰值，驱动流动在壁面处远离中心平面（$x = 0$ 或 $z = 0$），并沿通道中心线朝向中心平面（$y = 0$ 或 $r = 0$）。理论结果与数值结果吻合良好。值得注意的是，柱坐标情形中的中心线速度相较于笛卡尔情形有所增强。稍后我们将看到，这会如何改变此类构型中的有效弥散。图 3 分别展示了平行板通道（a、b）和圆柱通道（c、d）中，高阶溶质浓度的（a、c）数值模拟与（b、d）理论预测的比较。由于对称性，此处仅绘制区域的四分之一。再次针对 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 0.1$ 进行比较，结果表明数值结果与理论预测高度吻合。

在使用数值模拟验证理论解后，我们现在对扩散渗透弥散过程进行详细考察。我们首先考虑系统的早期动力学，在此期间形成溶质分布相对于纯一维动力学的初始偏差。图 4 通过展示早时间区间内 $\hat{c}_1$、c_1^∞ 和 c_1 的可视化结果，说明了这些早期动力学；时间最长达到 $t = 1\times10^{-3}$，且 $\epsilon = 0.1$ 和 $\Gamma_w/D_s = -1$。请注意，快速时间尺度对应于扩散穿过通道所需的特征时间，其由方程 (25) 中的 $\hat{c}_1$ 表示。相比之下，慢速时间尺度对应于沿通道方向的扩散，其由方程 (21) 中的 c_1^∞ 表示。这里，c_1 是溶质浓度分布相对于纯一维动力学的总偏差，由 c_1^∞ 和 $\hat{c}_1$ 两者之和形成。可以看出，$\hat{c}_1$ 的作用是抵消 c_1^∞ 的初始条件，从而使 c_1 的初始条件为零。于是，在此例中，$\hat{c}_1$ 在 $t = 10^{-3}$ 时几乎完全衰减，此后解由慢时间动力学主导。

预计早期动力学将在时间尺度 ϵ^2 内衰减。通过绘制 $\hat{c}_1$ 的峰值随一系列迁移率和 ϵ 值的变化关系即可验证这一点，如图5所示。实心点表示二维模拟的结果，其计算方式为 $\hat{c}_{\text{num}} = (c - c_0)/\epsilon^2 - c_{1,\text{theory}}^\infty$。具体而言，图5(*a*)显示了不同 Γ_w/D_s 值下、$\epsilon = 0.1$ 时 $\hat{c}_1$ 的峰值。如图所示，较高的 Γ_w/D_s 值对应较大的 $\hat{c}_1$ 峰值，反映出这些情况下增强的弥散。对于所有 Γ_w/D_s，在 t 达到 $\epsilon^2 = 10^{-2}$ 之前，$\hat{c}_1$ 的峰值似乎都已衰减殆尽。图5(b)通过在恒定的 $\Gamma_w/D_s = -1$ 下考察不同 ϵ 值的情况，进一步拓展了这些结果。在这里，虚线表示 $t = \epsilon^2$ 所在的位置。正如理论所预测的，在每种情况下，$\hat{c}_1$ 的峰值都将在时间尺度 $t = O(\epsilon^2)$ 内消失。

在 §II 中，我们建立了一个理论模型，用于描述扩散渗透引起的溶质浓度分布的高阶修正。如前所述，扩散渗透滑移流驱动通道内产生回流，从而改变溶质的输运。图 6 中 $t = 1$ 展示了两种坐标系下通道内的涡量和回流。这里，(a) 和 (c) 分别展示了平行板通道和圆柱形通道横截面上的无量纲涡量，其中 $\Gamma_w/D_s = -1$。表示横截面上再循环的流线叠加在色彩图之上。图 (b) 和 (d) 展示了相同的无量纲涡量数据，但采用了

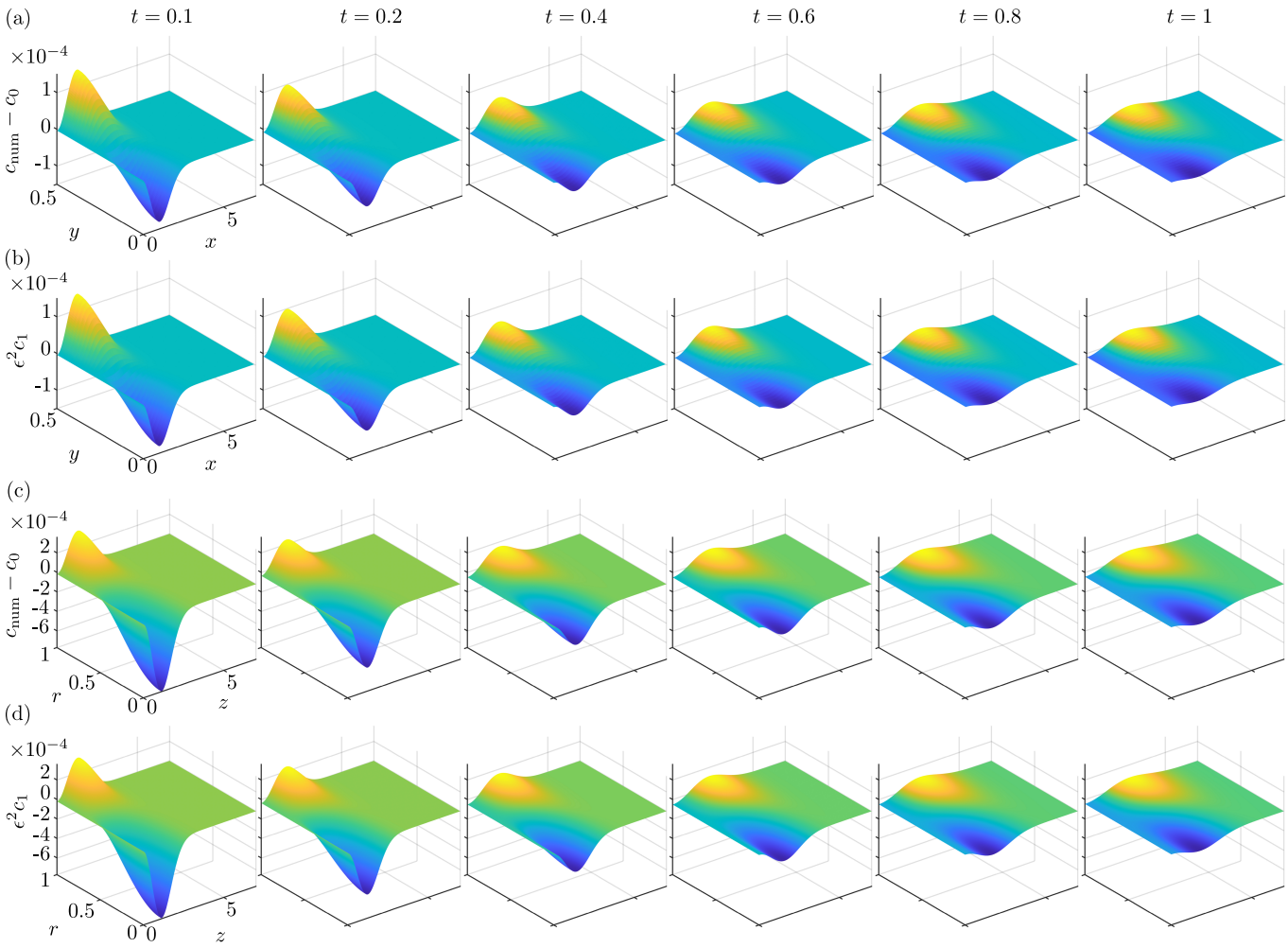

图 3. 笛卡尔几何构型 (a,b) 和圆柱几何构型 (c,d) 中高阶溶质浓度的演变。这展示了溶质浓度分布偏离纯一维动力学的情况，并体现了扩散渗透弥散的作用。带有 $c_{\text{num}} - c_0$ 的面板表示数值计算得到的溶质演变减去理论一维解，带有 $\epsilon^2 c_1$ 的面板则展示理论计算得到的高阶溶质分布。结果展示了 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 0.1$. 随时间的变化。

叠加显示缩放后的速度矢量图。当 $\Gamma_w/D_s = -1$ 时，通道壁处的扩散渗透驱动滑移流，使其远离中心平面，进而产生沿通道中心线朝向中心平面流动的回流。在迁移率为正的情况下，流动方向和涡量符号将发生反转。

接下来，我们将横截面上的高阶溶质动力学可视化，以更好地理解扩散渗透弥散对溶质输运的作用。图7 展示了平行板通道（a）和圆柱形通道（b）中 c_1 随 Γ_w/D_s 变化的理论值，时间固定为 $t = 1$。为了解读该图，请注意，负的 Γ_w 值表示沿壁面的滑移流远离中心平面，而沿通道中心线的滑移流朝向中心平面；正的 Γ_w 值则表示流动以相反方向形成循环。正值区域 c_1 （红色）表示相对于一维纯扩散情形（c_0），溶质浓度有所增加的位置；负值区域 c_1 （蓝色）表示浓度相对 c_0有所降低。我们可以如下理解这些区域的形成。例如，考虑平行板通道中 $\Gamma_w/D_s = -1$ 的情形。沿通道壁，流动远离中心平面 $x = 0$，将浓度相对较高的流体从 $x = 0$ 处带走，使远离中心平面处的溶质浓度有所增加。流动的循环特性也会增强这一效应，因为它同样将流体从通道中心线带向通道壁。沿中心线，流动则朝向中心平面，将浓度相对较低的流体带向中心平面，从而形成贫化区。正的 Γ_w/D_s情形则恰好相反。最后需要指出的是，对于相同的壁面滑移速度，圆柱管的中心线速度相对于二维

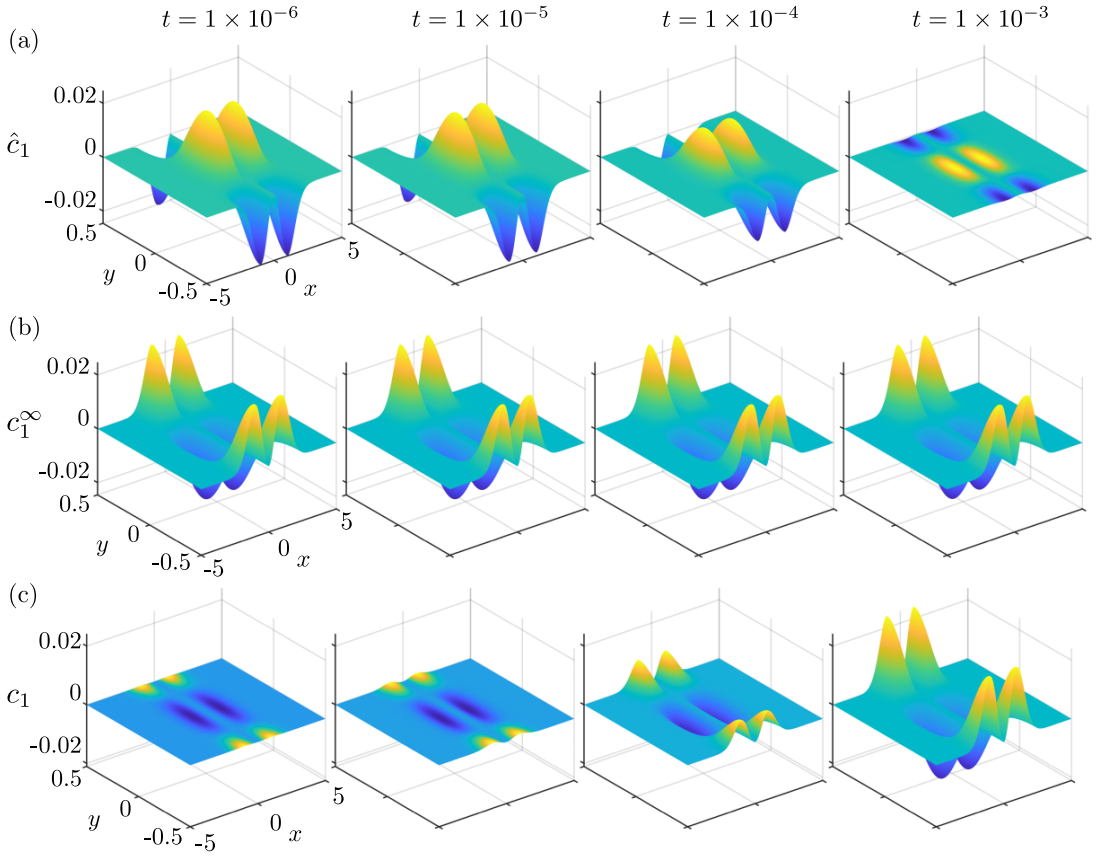

图 4. 早时间区间内高阶溶质贡献的各组成部分。结果计算时采用 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 0.1$，计算至时间 $t = 1\times10^{-3}$。这里，c_1^∞根据方程（21）计算，对应于多重时间尺度分析得到的长时间解。$\hat{c}_1$ 分量根据方程（25）计算，对应于满足初始条件所需的快时间动力学。因此，高阶溶质分布总量为 $c_1 = c_1^\infty + \hat{c}_1$。快时间动力学产生的贡献会在溶质横跨通道扩散的时间尺度内衰减，而长时间贡献则在沿通道扩散的时间尺度内衰减。

相同壁面滑移速度下的通道流动。

接下来，我们展示由 c_1^∞建模的溶质浓度分布的长时间行为。回想一下，当$t > O(\epsilon^2)$时，高阶溶质分布为 $c_1 \approx c_1^\infty$，因为$\hat{c}_1$ 已衰减。图8 展示了长时间结果，时间范围截至 $t = 1000$，其中 $\Gamma_w/D_s = -1$。这里，水平轴按$\sqrt{1+4t}$缩放，因为它表示 c_0 沿通道的扩展速率。回想一下，根据我们的无量纲化，这对应于沿通道扩散特征时间的 1000 倍，因此到此时溶质初始脉冲已充分衰减。如图所示，长时间内高阶溶质分布也会沿轴向显著扩展，同时保持定性上相同的形状，最终逐渐衰减。随着溶质初始脉冲衰减，壁面处的浓度梯度也随之减小，因此扩散渗透和回流也会随时间衰减，最终使 c_1衰减。这里，图（a）对应二维通道流情形，图（b）对应轴对称管流情形。两种情形之间唯一显著的差别是，柱坐标情形下高阶溶质浓度的量值高出 4–5 倍。如前所述，这是因为轴对称几何中的中心线速度相对较大，从而产生更大的速度梯度并增强弥散。

在继续研究截面平均动力学之前，我们先考察改变 ϵ 的影响，以及理论解在较大 ϵ时的失效。图9 展示了在 $\Gamma_w/D_s = -1$ 时，平行板通道中高阶溶质浓度分布的理论预测和数值预测 $t = 1$。如上所示，在 ϵ较小时，理论预测与数值结果吻合良好。这里可以看到，理论与模拟在数值上合理吻合的范围可达约 $\epsilon = 2$；超过该值后，理论预测便会失效。具体而言，如图 $\epsilon = 10$ 9所示，在附近，数值结果显示沿通道中心线的耗减更加均匀，而理论结果并非如此。
$x = 0$

最后，遵循分层　　根据 Taylor 和 Aris 的方法，我们考虑横截面平均后的动力学。

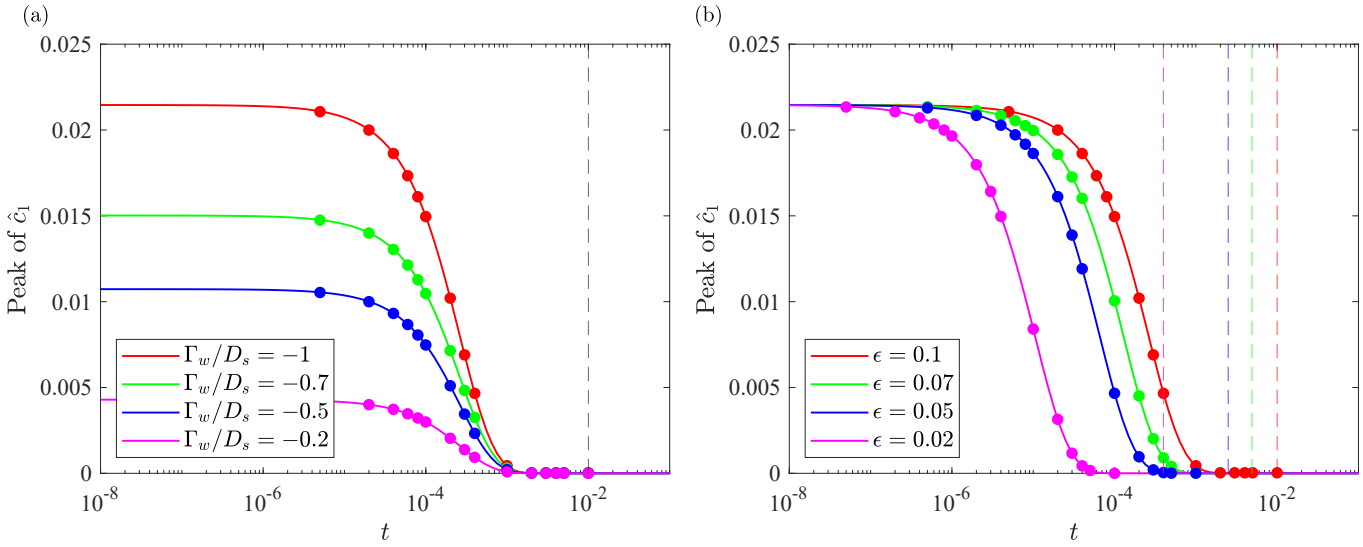

图 5. 通道中 $\hat{c}_1$ 峰值随时间的演化，分别为 (a) 固定 $\epsilon = 0$ 时的 / 函数。1 和 (b) 固定 $\Gamma_w/D_s = -1$ 时的 ϵ 函数。实心圆点表示二维数值模拟结果，$\hat{c}_{\text{数值模拟}} = (c - c_0)/\epsilon^2 - c_1^{\infty}$，理论。理论预测与二维数值模拟结果非常吻合。虚线表示 $t = \epsilon^2$ 时刻。回想一下，$\hat{c}_1$ 表示系统中的快时间动力学，对应于溶质在通道中的扩散，预计会在所示的时间尺度 $t \sim \epsilon^2$ 内衰减。在 (a) 中，随着 Γ_w/D_s 增大，幅值增大，这反映了更强的扩散渗透所带来的弥散增强。

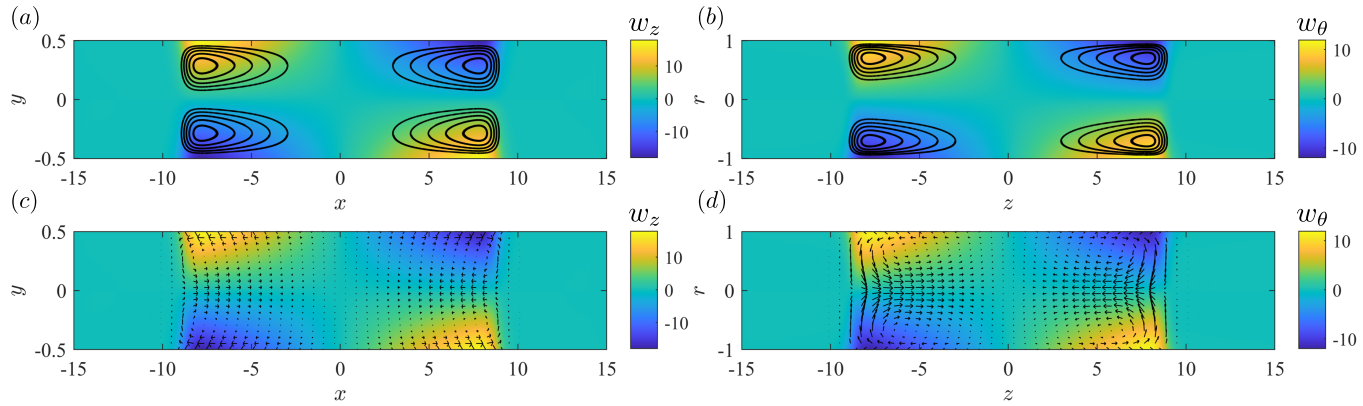

图 6. 当 $\Gamma_w/D_s = -1$ at $t = 1$ 时，扩散渗透驱动的再循环的无量纲涡量和流动可视化。(a) 和 (c) 对应二维通道流情形，(b) 和 (d) 对应轴对称管流情形。(a) 和 (b) 中给出了显示再循环区的流线，(c) 和 (d) 中给出了速度矢量图。结果对应主阶速度剖面，因此与 ϵ 无关。

浓度分布。在 §IID 中，我们推导了一个截面平均浓度方程，可用于模拟扩散渗透弥散的净效应。这些方程是相对简单的一维扩散方程，其有效扩散系数取决于通道几何形状，并能够捕捉弥散的影响。与相对简单的纯泰勒弥散情形不同，此处的有效扩散率不再是常数，而是通道内轴向位置和时间的函数，因为弥散的净效应会随时间和空间而演变。因此，有多种方法可用于表征横截面平均溶质动力学。首先，可以通过对这一维变扩散率模型进行数值时间积分，轻松获得其动力学过程。其次，可以对二维数值模拟的结果进行横截面平均。最后，可以对 $c = c_0 + \epsilon^2 c_1$ 的理论结果进行横截面平均，从而得到理论上的主导阶动力学。所有这些方法的结果都应在 $O(\epsilon^2)$ 阶精度内相互吻合。图 10 展示了平行板通道中横截面平均溶质动力学的可视化结果。这里，结果表示截面平均溶质浓度相对于一维结果的偏差，即 $c - c_0$。图 10(a) 展示了关于 $|\Gamma_w/D_s|$ 的函数关系，其中 $\epsilon = 0.1$，且 $t = 1$。实线表示理论预测。方形标记对应于

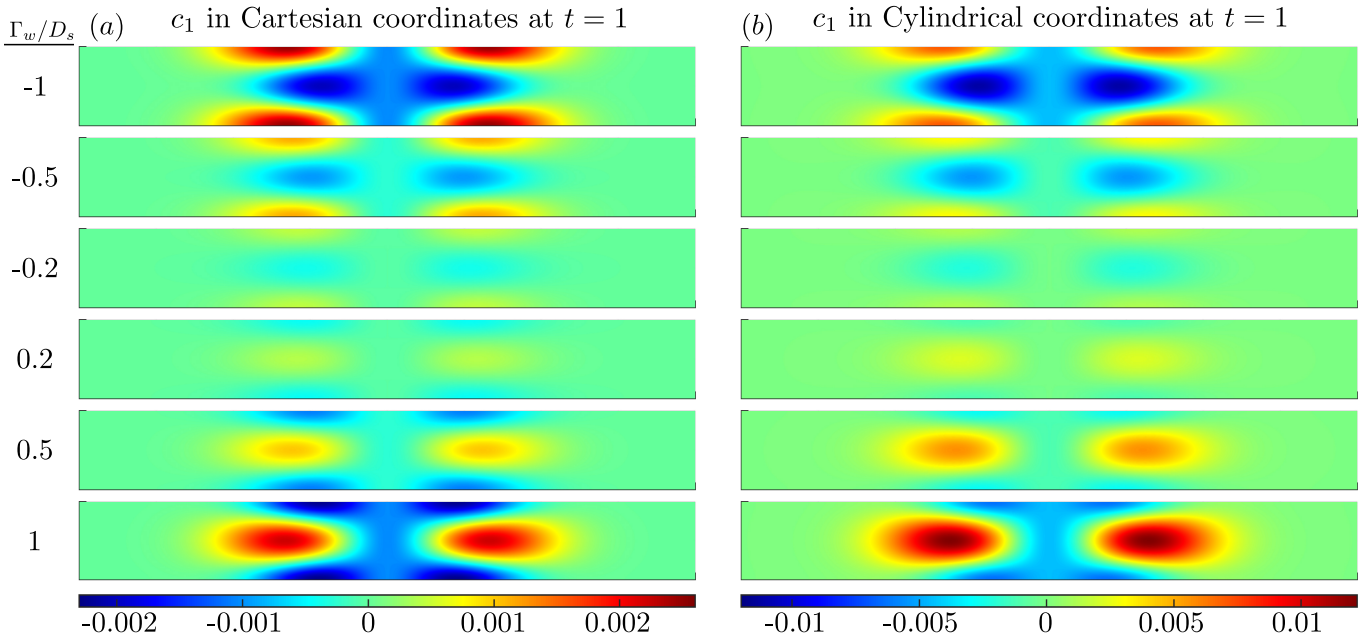

图 7. 高阶溶质浓度分布 c_1 作为 Γ_w/D_s 在 $t = 1$时的函数。面板 (a) 对应二维笛卡尔通道流系统，由方程 (21) 计算得到；面板 (b) 对应轴对称管流情形，由方程 (B19) 计算得到。在两个面板中，垂直坐标 (y 或 r) 均放大了 2 倍，以便于观察。

通过数值求解方程 (30) 给出的一维受迫扩散方程所得的结果。星形标记表示对二维数值模拟结果在横截面上取平均所得的结果。三种方法均显示出较好的一致性。请回顾在 §II D 中推导的有效扩散系数，其中扩散渗透的贡献为 $O(\Gamma_w/D_s)^2$,，因此迁移率的符号不会影响截面平均演化。

然而，增大 Γ_w/D_s 的幅值会增强扩散渗透相对于溶质扩散的作用，从而导致更大的弥散，并使结果进一步偏离 c_0。图 10(b) 显示了在 ϵ 条件下、 $|\Gamma_w/D_s| = 1$ 和 $t = 1$ 时，截面平均溶质浓度随其变化的关系。实线表示数值模拟结果，方形标记对应理论预测。随着 ϵ 的增大，扩散渗透弥散的幅值增大，使结果更加偏离纯扩散情形。理论预测与模拟结果在 $\epsilon = 2$ 之前均吻合良好。图 10(c,d) 给出了截面平均浓度分布随时间的变化。图 10(c) 显示了在 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 0$ 保持不变时，截面平均溶质浓度的理论预测（实线）和数值预测（星形符号）；而 (d) 显示了在 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 10$ 保持不变时，通过数值模拟得到的截面平均溶质浓度。随着时间推移，通道中心附近形成一个相对耗尽区，其左右两侧的累积区与之平衡，并围绕溶质峰值分布。需要注意的是， $x = 0$ 处的耗尽形成速度并不像 $x = 0$ 附近那样快，因此会出现一个随时间衰减的小凸起。这是因为由于对称性， $x = 0$ 处的轴向浓度梯度为零，所以中心平面附近的壁面滑移速度以及任何回流都可以忽略不计。因此，溶质仍需要一定时间进行扩散和调整。

此外，我们还研究了横截面平均浓度分布的展宽宽度。这里，我们将溶质分布的宽度定义为 L_{99},，它对应于轴向位置（x 或 z），此处浓度已衰减至当前峰值的 99%。图 11 展示了不同 ϵ 值范围内的数值结果，并将其与理论预测进行了比较。图 11(a) 展示了在 $\Gamma_w/D_s = -1$ 恒定时，不同 ϵ下浓度分布的重标度宽度随时间的变化。彩色标记表示溶质浓度的数值结果，实线和浅蓝色虚线分别表示 $c0 + \epsilon^2 c_1^\infty$和 c_0的分布宽度的理论预测。这里，分布宽度按 $\sqrt{1 + 4t}$ 进行了重标度，该量表示 c_0 的预期扩展速率。可以看出，结果趋于常数，表明高阶溶质分布的展宽由 c_0 的展宽决定。这是因为，尽管分布边缘处的 c_0变小， c_0 的对数梯度仍可能很大，使扩散渗透弥散能够作用于相对更宽的分布范围。随着 ϵ 增大，高阶溶质分布的宽度也随之增大。图 11(b) 展示了在固定时间$t = 1$、 $\Gamma_w/D_s = -1$ 恒定时，L_{99} 随 ϵ 的变化。这里， $c_0 + \epsilon^2 c_1^\infty$和 c_0 的理论预测分别以实线和虚线表示。

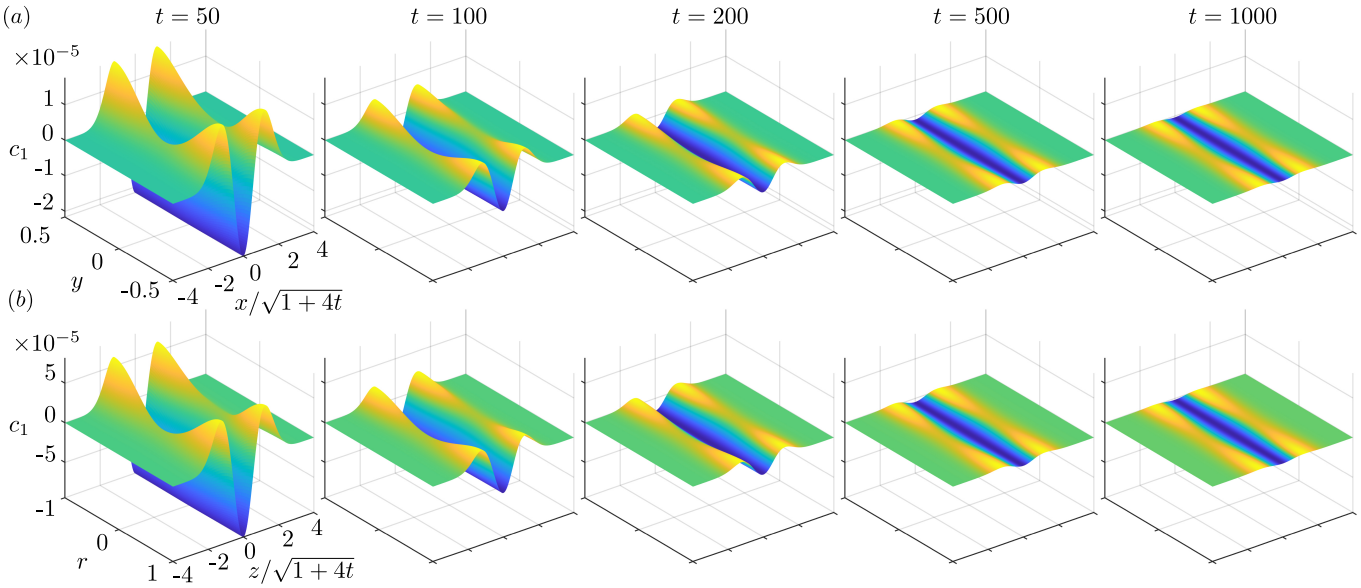

图 8. c_1 的高阶溶质浓度在 $\Gamma_w/D_s = -1$ 条件下直至 $t = 1000$的长时间行为。面板 (a) 对应二维通道流情形，面板 (b) 对应轴对称管流情形。在两种情形下，轴向坐标均按 $\sqrt{1+4t}$进行缩放，表明高阶溶质效应以与 c_0相同的速率扩散。随着时间推移，壁面处的溶质浓度梯度随着溶质脉冲扩散开而减小，导致通道壁上的扩散渗透减弱、再循环减少，从而弥散减弱。最终，高阶分布因扩散而变得模糊，系统动力学趋近于纯扩散的动力学。

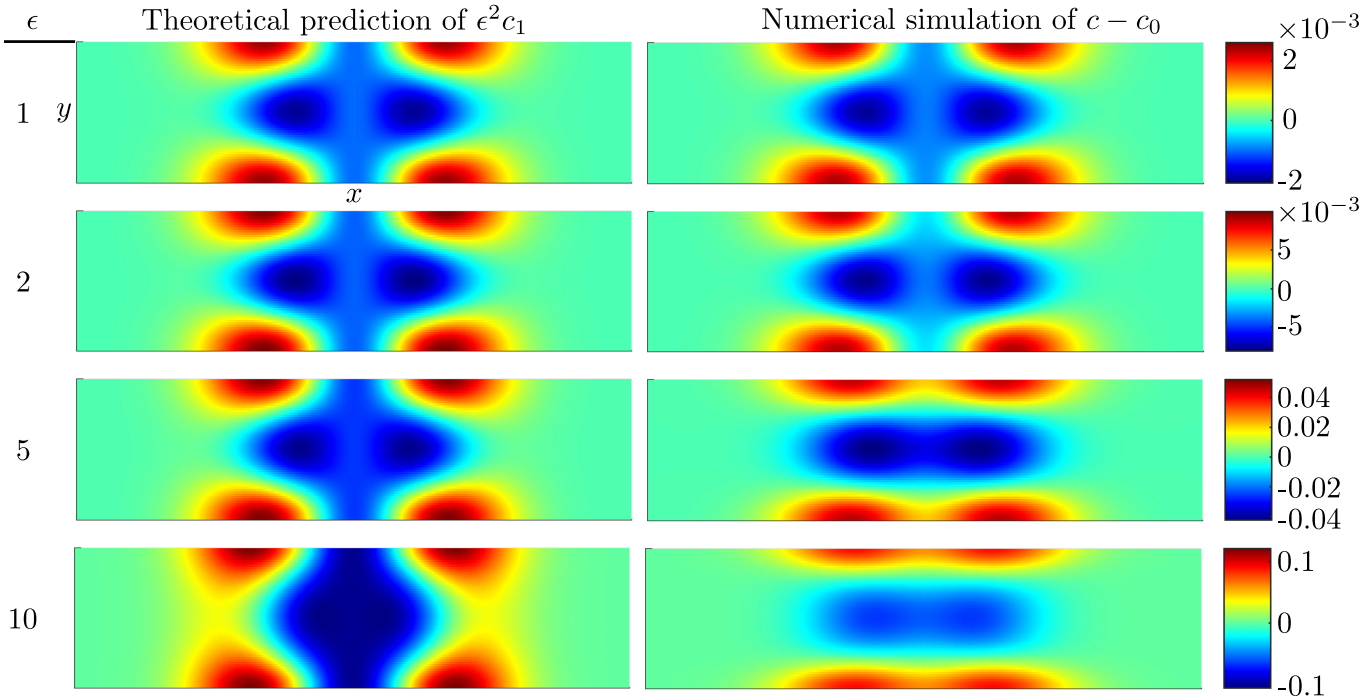

图 9. 高阶溶质浓度分布 $\epsilon^2 c_1$ 在平行板通道中，其中 $\Gamma_w/D_s = -1$ 在 $t = 1$处。（a）图对应于理论预测，由方程（21）计算得出；（b）图对应于数值模拟结果。可以看出，当超过约 $\epsilon = 2$ 时，理论结果似乎开始失效。

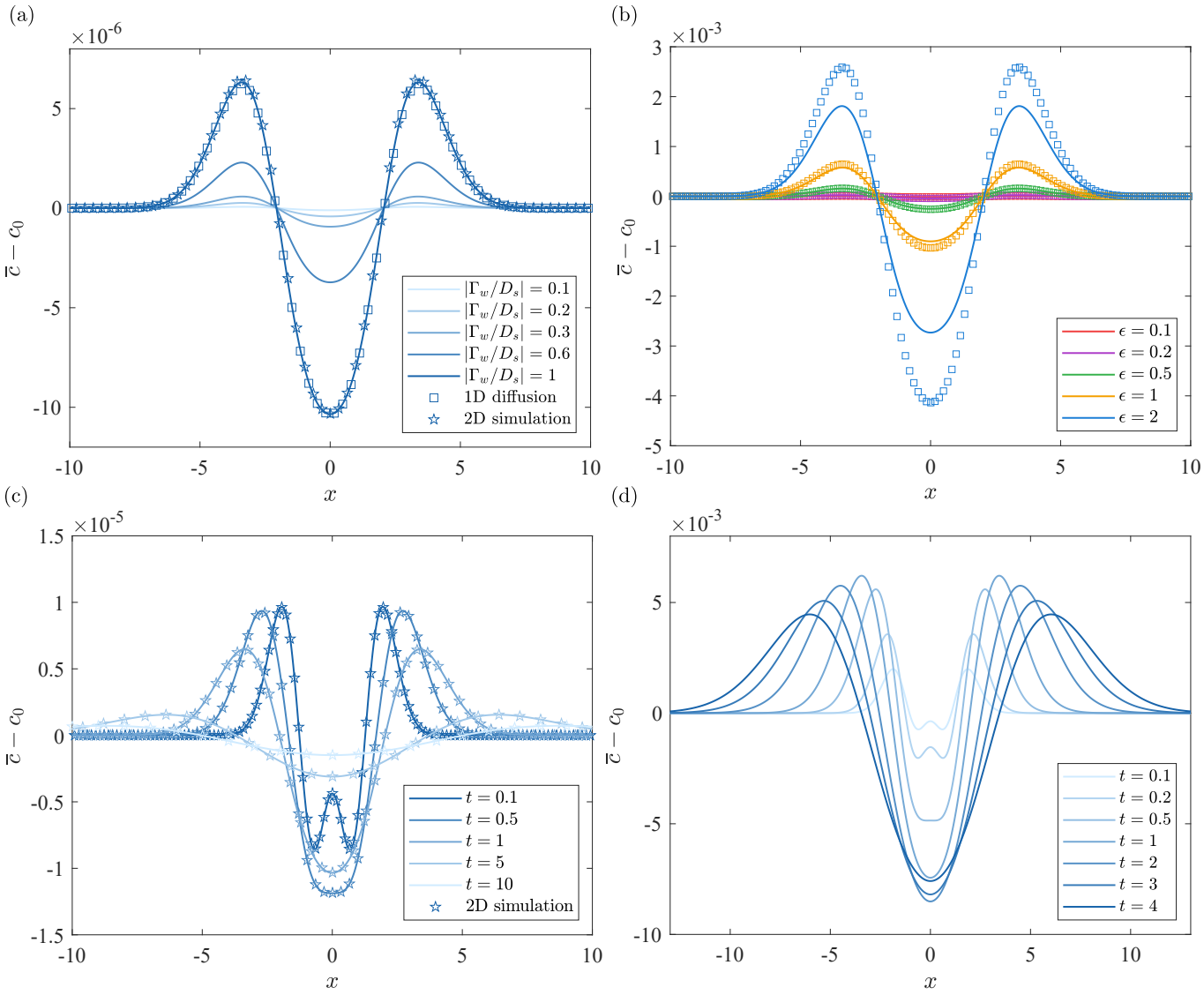

图 10. 二维通道流情形下横截面平均溶质动力学的演变。结果显示横截面平均溶质浓度 c 减去纯扩散结果 c_0。(a) 结果随 $|\Gamma_w/D_s|$ 的变化，其中 $\epsilon = 0.1$ 和 $t = 1$。实线对应第二节 D 中推导的横截面平均理论结果。方形符号对应式 (30) 给出的一维受迫扩散方程的数值解。星形符号表示完整二维数值模拟的横截面平均值。三种计算 $c - c_0$ 的方法在较小的 ϵ 下均表现出极佳的一致性。(b) 结果随 ϵ 的变化，其中 $|\Gamma_w/D_s| = 1$ 和 $t = 1$。实线对应数值结果，方形标记表示理论预测。理论预测中的误差在图中体现为 $\epsilon \geq 2$。(c) 在固定 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 0.1$ 时的随时间变化结果。实线对应理论预测，星形符号表示完整二维数值模拟的横截面平均值。(d) 在固定 $\Gamma_w/D_s = -1$ 和 $\epsilon = 10$ 时，一维模型随时间变化的数值结果。

符号标记对应数值结果。在给定时间下，ϵ 值越大，分布宽度越大。对于 $\epsilon < 1$，理论预测与数值模拟结果吻合良好；即使在 $\epsilon = 10$ 时，该指标的模拟结果与理论预测之间的误差仍小于 10%。

五、结论

在本研究中，我们研究了狭长通道中的扩散渗透弥散，通道中心起初有一个溶质高斯塞。该溶质扩散所产生的浓度梯度会在通道壁面诱导扩散渗透滑移流。滑移流反过来驱动通道内部发生再循环，使得溶质输运并非纯粹由扩散完成，同时还包含对流。因此

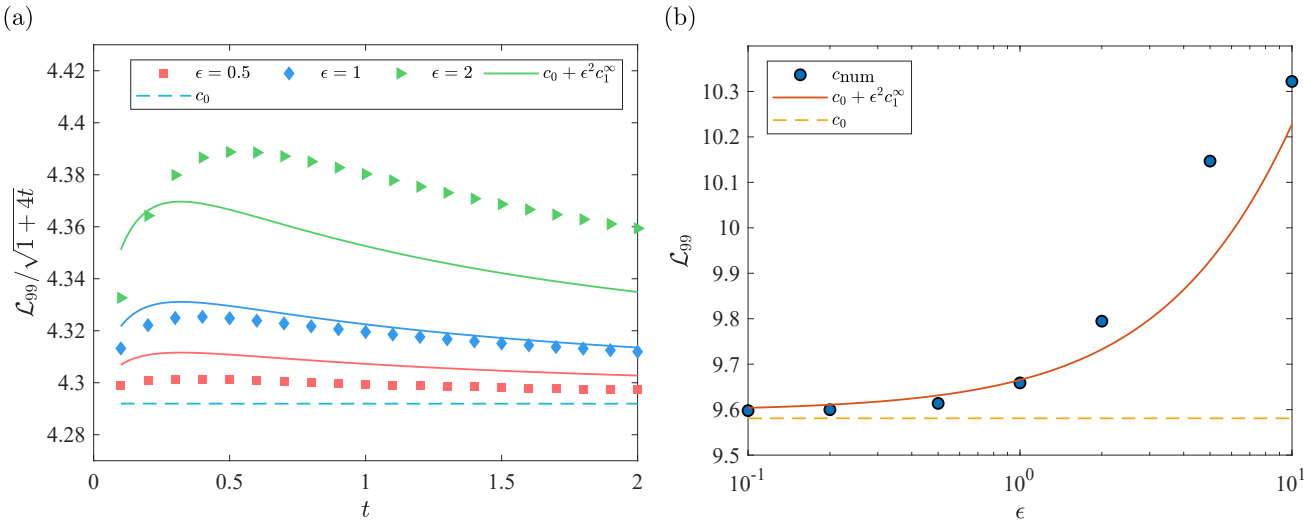

图 11. 横截面平均高阶溶质浓度的重标度宽度 $\mathrm{L}_{99}/\sqrt{1+4t}$，其中 $\Gamma_w/D_s = -1$。分布宽度的定义满足 $\overline{c(\mathrm{L}_{99},\ t)} = 0.01\,\bar{c}(0,\ t)$。(a) 分布宽度随 ϵ 变化的瞬态演化。符号表示数值模拟结果，实线和浅蓝色虚线分别表示 $c0 + \epsilon^2 c_1^\infty$ 和 c_0 扩散的理论预测。(b) $t = 1$ 时的分布宽度随 ϵ 变化的关系。结果表明，当 $\epsilon < 1$ 时，理论预测效果良好。随着 ϵ 增大，扩散渗透会提高溶质脉冲的扩散速率，但随着溶质梯度减弱，这种效应会随时间衰减。

通道中的再循环流体流动引入了剪切流，使溶质浓度分布发生变形，并改变其有效输运过程，这与泰勒弥散的过程类似。我们针对二维通道流和轴对称管流，推导了此类系统中耦合的流体与溶质动力学理论解。理论推导采用了多时间尺度分析，同时纳入快速和慢速时间动力学。通过对控制方程沿横截面进行平均，并结合首阶解，我们将系统化简为一个具有可变有效扩散系数的一维扩散方程；该有效扩散系数取决于系统几何形状，并以平均意义体现了扩散渗透弥散的影响。这种方法类似于泰勒和阿里斯在研究泰勒弥散时所采用的方法。我们将这一有效一维模型的数值解与二维数值模拟的横截面平均结果以及理论平均结果进行了比较，三者均表现出良好的一致性。在可能的情况下，我们使这一分析不依赖于特定的初始条件，唯一的限制是初始条件应在横截面上保持均匀，并且其特征分布相对于通道宽度而言应具有足够的扩展范围。本文所选用的具体高斯初始条件，仅是在采用傅里叶变换求解 $B(x,t)$ 时才需要。因而，尽管有效扩散系数的完整推导并非完全一般化，但只需修改计算中的这一部分，就可以很容易地将其调整到其他系统和初始条件。还可以尝试寻找一个关于初始溶质浓度保持一般性的 $B(x,t)$ 显式解，但这一问题留待未来研究。本文所呈现的结果和分析阐明了扩散渗透驱动的再循环对直通道或管流中溶质输运的作用，并展示了如何将横截面平均的有效动力学化简为类似于泰勒弥散的一维有效扩散问题。

附录 A：数值细节

本节将讨论数值收敛测试。在笛卡尔情形的数值模拟中，我们采用了时间上二阶精度、空间上四阶精度的数值格式。对于柱坐标情形，我们采用了时间和空间上均为二阶精度的数值格式。图 12 展示了 $\Gamma_w/D_s = -1$的数值收敛研究结果。实线为最佳拟合幂律曲线，相应颜色的方程为对应的拟合幂律函数。图 12a 展示了在 $t = 0$处，$c_0 + \epsilon^2 c_1$ 的理论预测与数值预测之间的相对范数误差。01，随着 ϵ的值增大。溶质浓度 $c_0 + \epsilon^2 c_1$ 的理论预测包含由扩散渗透引起的修正项，其阶数为 ϵ^4。当 ϵ 趋于零时，理论预测收敛至 c_0，这也可以从图 12a中观察到。图 12b 展示了时间步长 dt下，笛卡尔情形和柱坐标情形的收敛阶，其中 $\epsilon = 0.1$。此处，我们固定了

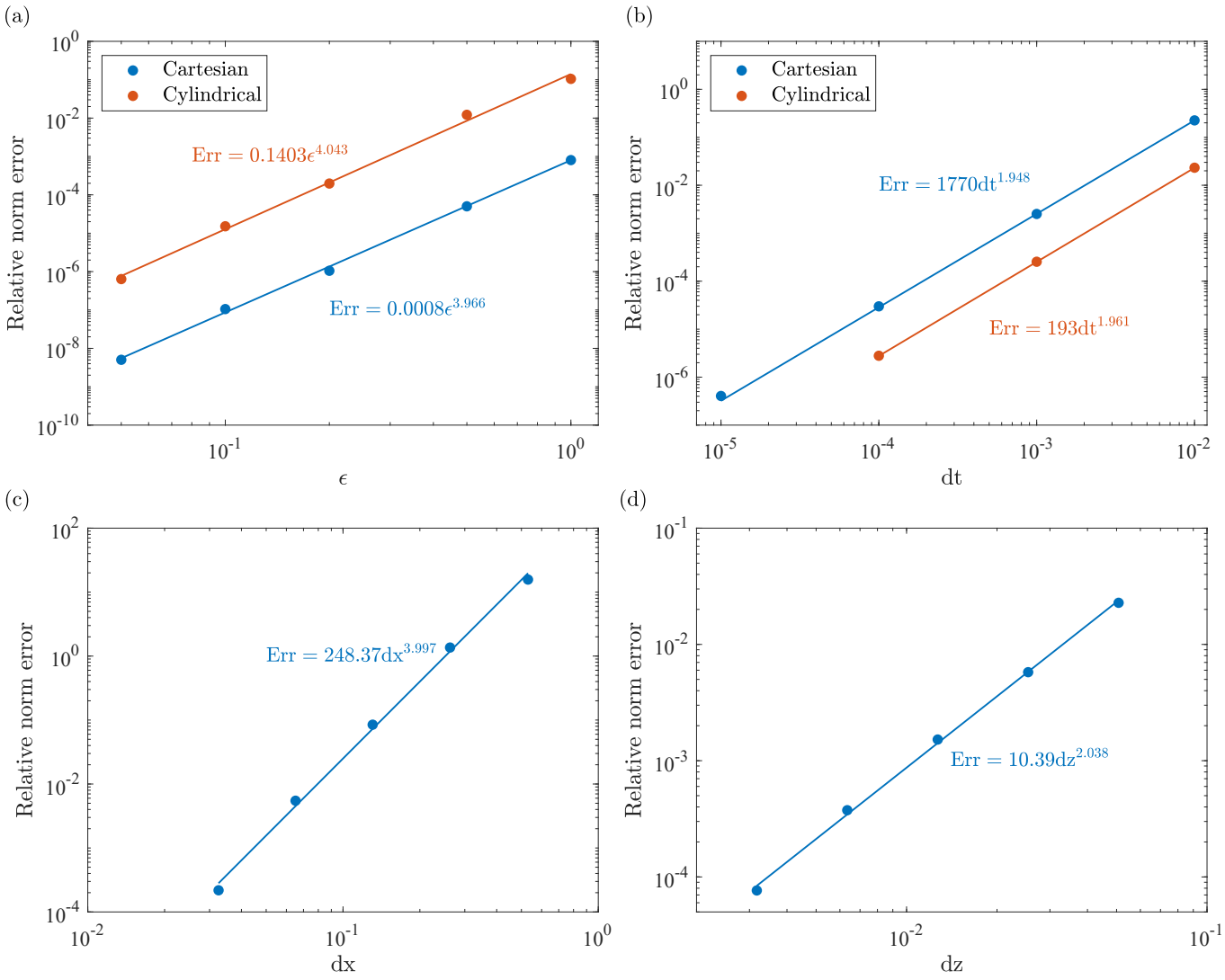

图 12. 柱坐标情形和笛卡尔收敛研究中，$\Gamma_w/D_s = -1$的相对范数误差。实线表示最佳拟合幂律曲线，颜色相同的方程表示对应的拟合幂律函数。(a) 在 $t = 0.01$时，$c_0 + \epsilon^2 c_1$ 的理论预测值与数值预测值之间的相对范数误差随 ϵ 变化的关系。(b) 柱坐标情形的网格尺寸为 2049×1025 、笛卡尔情形的网格尺寸为 1600×200 时，相对于时间步长 dt 的收敛测试结果。此处，最终时间为 0.1，且 $\epsilon = 0.1$。(c) 笛卡尔情形下相对于 dx的空间收敛测试结果。(d) 柱坐标情形下相对于 dz的空间收敛测试结果。此处，空间收敛研究使用 $\epsilon = 0.1$、$\mathrm{dt} = 1 \times 10^{-5}$ 和$t_{最终}$= 0.1。

柱坐标情形的网格尺寸为 2049×1025，笛卡尔情形的网格尺寸为 1600×200。两种情形下，模拟均运行至 $t = 0.1$。相对范数误差是相对于模拟中最小的 dt 情形计算的。如图 12*b*中的最佳拟合曲线所示，笛卡尔情形和柱坐标情形的时间精度均为二阶，绝对范数误差按 $O(\mathrm{dt}^2)$ 递减，符合预期。两种情形均选取 $\mathrm{dt} = 10^{-4}$，因为相对误差小于 10^{-4}。图 12*c* 和 12*d* 分别展示了笛卡尔情形和柱坐标情形在 $\epsilon = 0.1$ 下的空间收敛研究。这里，在笛卡尔和柱坐标情形的空间收敛研究中，我们均采用 $\mathrm{dt} = 1 \times 10^{-5}$ 和 $t_{\mathrm{final}} = 0.1$。相对范数误差是相对于模拟中最精细的网格计算的。如图 12*c* 和 12*d*所示，笛卡尔情形下的误差为 $O(\mathrm{dx}^4)$，柱坐标情形下的误差为 $O(\mathrm{dz}^2)$。

附录 B：圆柱通道的推导

本节展示轴对称圆柱坐标系下流体与溶质动力学的理论解。一般步骤与二维笛卡尔坐标系下的相同。该系统的控制方程由（1）给出。这里，我们考虑轴对称构型。我们引入以下无量纲化：

$$z = \frac{z^*}{\ell},\ r = \frac{r^*}{a},\ u_z = \frac{u_z^*}{U},\ u_r = \frac{u_r^* \ell}{Ua},\ P = \frac{P^* a^2}{\mu U \ell},\ \epsilon = \frac{a}{\ell},\ \ U = \frac{D_s}{\ell},\ t = \frac{t^*}{\ell^2/D_s}. \tag{B1}$$

采用这些尺度后，　　圆柱坐标下控制方程的无量纲形式为

$$\frac{1}{r}\frac{\partial (r u_r)}{\partial r} + \frac{\partial u_z}{\partial z} = 0, \tag{B2a}$$

$$-\frac{\partial p}{\partial r} + \epsilon^2 \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u_r}{\partial r}\right) - \epsilon^2 \frac{u_r}{r^2} + \epsilon^4 \frac{\partial^2 u_r}{\partial z^2} = 0, \tag{B2b}$$

$$-\frac{\partial p}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial u_z}{\partial r}\right) + \epsilon^2 \frac{\partial^2 u_z}{\partial z^2} = 0, \tag{B2c}$$

$$\epsilon^2 \frac{\partial c}{\partial t} + \epsilon^2 u_r \frac{\partial c}{\partial r} + \epsilon^2 u_z \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c}{\partial r}\right) + \epsilon^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}. \tag{B2d}$$

控制方程（B2）的解须满足流体和溶质的边界条件。这些边界条件可概括为：

$$\text{Quiescent far-field conditions: } p = 0 \ \text{ and } \ u_z = 0 \ \text{ and } \ c = 0 \ \text{ at } z = \pm\infty, \tag{B3}$$

$$\text{No fluid penetration at the walls: } u_r = 0 \text{ at } r = 1, \tag{B4}$$

$$\text{No-flux conditions at the channel walls: } \frac{\partial c}{\partial r} = 0 \text{ at } r = 1, \tag{B5}$$

$$\text{Diffusioosmotic wall slip boundary condition: } u_z = \frac{\Gamma_w}{D_s}\frac{\partial \ln c}{\partial z} \text{ at } r = 1. \tag{B6}$$

与笛卡尔情形类似，我们采用多重时间尺度方法 [9]，其中引入快时间变量 $T = t/\epsilon^2$。也就是说， $T = O$在无量纲时间 $\sim a^2/D_s$ 上为 (1)，对应于 $t = O(\epsilon^2)$；而 $t = O$在无量纲时间 l^2/D_s 上为 (1)。因此，我们将对流-扩散方程改写为：

$$\epsilon^2 \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial c}{\partial T} + \epsilon^2 u_r \frac{\partial c}{\partial r} + \epsilon^2 u_z \frac{\partial c}{\partial z} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c}{\partial r}\right) + \epsilon^2 \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}. \tag{B7}$$

同样，与笛卡尔坐标中采用的方法类似，我们将控制方程的解析解表示为关于小参数 $\epsilon = a/l$ 的摄动展开，其形式为

$$c(r,z,t,T) = c_0(r,z,t,T) + \epsilon^2 c_1(r,z,t,T) + \epsilon^4 c_2(r,z,t,T) + \ldots, \tag{B8a}$$

$$p(r,z,t,T) = p_0(r,z,t,T) + \epsilon^2 p_1(r,z,t,T) + \epsilon^4 p_2(r,z,t,T) + \ldots, \tag{B8b}$$

$$u_z(r,z,t,T) = u_{z0}(r,z,t,T) + \epsilon^2 u_{z1}(r,z,t,T) + \epsilon^4 u_{z2}(r,z,t,T) + \ldots, \tag{B8c}$$

$$u_r(r,z,t,T) = u_{r0}(r,z,t,T) + \epsilon^2 u_{r1}(r,z,t,T) + \epsilon^4 u_{r2}(r,z,t,T) + \ldots. \tag{B8d}$$

我们首先需要得到 l　　阶主导速度和压力解。这些解可通过代入获得

方程（B8）到控制方程中，得到

$$\frac{\partial u_{z0}}{\partial z} + \frac{u_{r0}}{r} + \frac{\partial u_{r0}}{\partial r} = 0, \tag{B9a}$$

$$\frac{\partial p_0}{\partial r} = 0, \tag{B9b}$$

$$-\frac{\partial p_0}{\partial z} + \frac{1}{r}\frac{\partial u_{z0}}{\partial r} + \frac{\partial^2 u_{z0}}{\partial r^2} = 0, \tag{B9c}$$

$$\frac{\partial c_0}{\partial T} = \frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial c_0}{\partial r}\right), \tag{B9d}$$

在主导阶下。考虑到初始条件给定为 $c_0(T=0, t=0) = \exp(-z^2)$，且通道壁处满足无通量条件，即 $\frac{\partial c_0}{\partial r}(r = \pm 1) = 0$，因此必然有 $c_0(r, z, t, T) = c_0(z, t)$，其中$c_0(t=0) \equiv \exp(-x^2)$。

为求解主导阶速度，我们首先取方程（B9*a*），并求解 u_{z0}，其满足滑移边界条件（B6）。主导阶 u_{z0} 变为

$$u_{z0} = \frac{\Gamma_w}{D_s c_0}\frac{\partial c_0}{\partial z} + \frac{1}{4}(-1 + r^2)\frac{\partial p_0}{\partial z}. \tag{B10}$$

这里， u_{z0} 有一项包含 $p_0(z,\ t)$，可通过考虑质量守恒并对通道横截面进行积分求得，

$$\int_0^1 u_{z0} 2\pi r\, dr = 0. \tag{B11}$$

按照这一方法，可得 $p_0(z,\ t)$。

$$p_0 = 8\frac{\Gamma_w}{D_s}\ln(c_0). \tag{B12}$$

根据方程（B12），u_{z0}（r，z，t）可以简化并写为

$$u_{z0} = \frac{\Gamma_w}{D_s c_0}(-1 + 2r^2)\frac{\partial c_0}{\partial z}. \tag{B13}$$

为求解 $u_{r0}(r,\ z,\ t)$，我们对连续性方程（B9a）积分，并应用由（5）给出的边界条件。这给出首阶 u_{r0} 为

$$u_{r0} = \frac{\Gamma_w r(-1 + r^2)}{D_s 2c_0^2}\left(\left(\frac{\partial c_0}{\partial z}\right)^2 - c_0\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}\right). \tag{B14}$$

将渐近展开代入对流-扩散方程，可得首阶结果：

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} + \frac{\partial c_1}{\partial T} + u_{z0}\frac{\partial c_0}{\partial z} - \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2} - \frac{1}{r}\frac{\partial c_1}{\partial r} - \frac{\partial^2 c_1}{\partial r^2} = 0, \tag{B15}$$

满足初始条件 $c_0(t=0) = \exp(-z^2)$ 和 $c_1(t = T = 0) = 0$。为求解该方程，我们注意到，在长时间下，所有快时间动力学都应已衰减，因此可以忽略时间导数项，并对整个通道进行平均，得到

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} = \frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}. \tag{B16}$$

与笛卡尔情形一样，其解为

$$c_0(z, t) = \frac{1}{\sqrt{1 + 4t}}\exp\left(-\frac{z^2}{1 + 4t}\right). \tag{B17}$$

将其代入（B15）得

$$\frac{\partial c_0}{\partial t}+\frac{\Gamma_w}{D_s c_0}(-1+2r^2)\left(\frac{\partial c_0}{\partial z}\right)^2+\frac{\partial c_1}{\partial T}-\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}-\frac{1}{r}\frac{\partial c_1}{\partial r}-\frac{\partial^2 c_1}{\partial r^2}=0. \tag{B18}$$

在长时间极限下，快速时间尺度上的动力学过程已经衰减，因此可以忽略相对于 T 的导数，并对该方程进行积分，得到

$$c_1(T\to\infty)\sim c_1^{\infty}(r,z,t)=\frac{1}{8}r^2\left[2\frac{\partial c_0}{\partial t}+\frac{\Gamma_w}{D_s c_0}(-2+r^2)\left(\frac{\partial c_0}{\partial z}\right)^2-2\frac{\partial^2 c_0}{\partial z^2}\right]+B(z,t), \tag{B19}$$

其中， $B(z,t)$ 是通过积分得到的一个尚未知函数。通过应用质量守恒定律，并对对流-扩散方程取横截面平均值，即可确定该函数，从而得到：

$$\frac{\partial B}{\partial t}=\frac{\partial^2 B}{\partial z^2}-\frac{e^{\frac{-z^2}{1+4t}}\Gamma_w/D_s(2+32t^2+4t(4+\Gamma_w/D_s z^2)+\Gamma_w/D_s(z^2-z^4))}{3(1+4t)^{9/2}}. \tag{B20}$$

采用傅里叶变换方法，可以求得其解为

$$B=\frac{2\Gamma_w/D_s\left[16z\alpha^2+4\Gamma_w/D_s t(3\alpha^2-12\alpha z^2+4z^4)-3\Gamma_w/D_s\alpha^2(\alpha-2z^2)\ln\alpha\right]}{e^{\frac{z^2}{\alpha}}(\alpha^{7/2}(96+384t))}. \tag{B21}$$

该方程不满足初始条件，因此它还不是高阶溶质动力学的完整解。现在，我们来求一个解 $c_1(r,\ z,\ t,\ T)=c_1^{\infty}(r,\ z,\ t)+\hat{c}_1(r,\ z,\ t,\ T)$。代入方程（B7），得到

$$\frac{\partial \hat{c}_1}{\partial T}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial \hat{c}_1}{\partial r}\right), \tag{B22}$$

初始条件为

$$\hat{c}_1(T=0)=-c_1^{\infty}(t=0)=-\frac{1}{6}e^{-z^2}\frac{\Gamma_w}{D_s}(2-6r^2+3r^4)z^2. \tag{B23}$$

其解的形式为贝塞尔级数 $\hat{c}_1(r,T)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n e^{-\lambda_n^2 T}J_0(\lambda_n r)$，其初始条件为 $f(r)=-\frac{1}{6}e^{-z^2}\frac{\Gamma_w}{D_s}(2-6r^2+3r^4)z^2$，边界条件为 $\frac{\partial \hat{c}_1}{\partial r}=0$，其中 $r=1$。利用边界条件，可以求得 λ_n 为 J_1 的根，我们将其记为 $j_{1,n}$。系数 a_n 可按如下方式确定。

$$\begin{aligned}a_n&=\frac{2}{J_0(j_{1,n})^2}\int_0^1 r f(r)J_0(j_{1,n}r)\,dr\\&=-\frac{e^{-z^2}\frac{\Gamma_w}{D_s}z^2(96J_2(j_{1,n})-J_1(j_{1,n})j_{1,n}(24+j_{1,n}^2))}{3J_0(j_{1,n})^2 j_{1,n}^4}.\end{aligned} \tag{B24}$$

因此，$\hat{c}_1$ 的解如下

$$\hat{c}_1(r,z,t,T)=2\int_0^1 r f(r)\,dr+\sum_{n=1}^{\infty}a_n e^{-j_{1,n}^2 T}J_0(j_{1,n}r). \tag{B25}$$

然后我们可以构　利用 $T=t/\epsilon$这一事实，构造一个对所有 t 均有效的复合解 $c_1=c_1^{\infty}+\hat{c}_1$　　[2].

[1] B. M. Alessio、S. Shim、E. Mintah、A. Gupta 和 H. A. Stone。多种电解质存在时的扩散泳与扩散渗透协同作用：二维粒子运动。《物理评论：流体》，6(5):054201，2021年。[2] B. M. Alessio、S. Shim、A. Gupta 和 H. A. Stone。胶体的扩散渗透驱动弥散：具有实验验证的泰勒弥散分析。《流体力学杂志》，942，2022年。[3] M. Aminian、F. Bernardi、R. Camassa、D. M. Harris 和 R. M. McLaughlin。边界如何影响化学物质的输送

微流体学。《科学》，354(6317):1252–1256，2016年。[4] J. L. Anderson 和 D. C. Prieve。扩散泳：溶质浓度梯度中胶体颗粒的迁移。《分离与纯化方法》，13(1):67–103，1984年。[5] R. Aris。论溶质在流经管道的流体中的弥散。《伦敦皇家学会会刊》，235(1200):67–77，1956年。[6] J. T. Ault、P. B. Warren、S. Shin 和 H. A. Stone。一维溶质梯度中的扩散泳。《软物质》，13(47):9015–9023，2017年。[7] J. T. Ault、S. Shin 和 H. A. Stone。利用扩散渗透表征表面-溶质相互作用。《软物质》，15(7):1582–1596，2019年。[8] N.G. Barton。论溶质弥散的矩方法。《流体力学杂志》，126:205–218，1983年。[9] C. M. Bender 和 S Orszag。《科学家与工程师的高级数学方法 I：渐近方法与扰动理论》，第1卷。施普林格科学与商业媒体，1999年。[10] S. E. Bone、H. G. Steinr¨uck 和 M. F. Toney。清洁水技术中的先进表征。《焦耳》，4(8):1637–1659，2020年。[11] H. Brenner。球体朝向平面表面缓慢穿过黏性流体的运动。《化学工程科学》，16(3-4):242–251，1961年。[12] H. Brenner 和 D. A. Edwards。《宏观输运过程》。巴特沃思-海涅曼，1993年。[13] Adnan Chakra、Naval Singh、Goran T Vladisavljevi´c、Fran¸cois Nadal、C´ecile Cottin-Bizonne、Christophe Pirat 和 Guido Bolognesi。通过扩散泳在单结和双结微通道中连续操控并表征胶体微珠和脂质体。arXiv预印本 arXiv:2302.05800，2023年。[14] H. C. W. Chu、S. Garoff、T. M. Przybycien、R. D. Tilton 和 A. S. Khair。平行板通道中稳态及时间振荡二维流的弥散。《流体物理》，31(2):022007，2019年。[15] H. C.W. Chu、S. Garoff、R. D. Tilton 和 A. S. Khair。扩散泳胶体与趋化性微生物的宏观输运理论。《流体力学杂志》，917，2021年。[16] B. V. Derjaguin、S. S. Dukhin 和 A. A. Korotkova。电解质溶液中的扩散泳及其在橡胶胶乳离子沉积成膜机制中的作用。《胶体杂志》，23(1):53，1961年。[17] D. Florea、S. Musa、J. Huyghe 和 H. M. Wyss。离子交换和扩散泳驱动的胶体长程排斥。《美国国家科学院院刊》，111(18):6554–6559，2014年。[18] I. Frankel 和 H. Brenner。论广义泰勒弥散理论的基础。《流体力学杂志》，204:97–119，1989年。[19] A. Gupta、A. G. Rajan、E. A. Carter 和 H. A. Stone。泊松-玻尔兹曼模型中电双层的离子分层与过充电。《物理评论快报》，125(18):188004，2020年。[20] A. Gupta、S. Shim 和 H. A. Stone。扩散泳：从稀电解质到浓电解质。《软物质》，16(30):6975–6984，2020年。[21] A. Gupta、P. J. Zuk 和 H. A. Stone。圆柱形纳米孔中重叠双电层的充电动力学。《物理评论快报》，125(7):076001，2020年。[22] A. Kar、T. Chiang、I. Ortiz Rivera、A. Sen 和 D. Velegol。增强物质进出盲端孔的输运。《ACS纳米》，9(1):746–753，2015年。[23] H. J. Keh 和 H. C. Ma。电解质溶液沿带电平面壁的扩散渗透。《朗缪尔》，21 5467，2005 12 5461( ): – 。[24] H. Lee、J. Kim、J. Yang、S. W. Seo 和 S. J. Kim。用于连续水净化的胶体颗粒扩散泳排斥。《实验室芯片》，18(12):1713–1724，2018年。[25] S. Lee、J. Lee 和 J. T. Ault。可变ζ电位对扩散泳和扩散渗透输运的作用。《胶体与表面A》，第130775页，2022年。ISSN 0927-7757。[26] R. E. Migacz 和 J. T. Ault。泰勒弥散溶质中的扩散泳。《物理评论：流体》，7(3):034202，2022年。[27] P. Moin。《工程数值分析基础》。剑桥大学出版社，2010年。[28] J. Palacci、B. Ab´ecassis、C. Cottin-Bizonne、C. Ybert 和 L. Bocquet。整流扩散泳作用下的胶体运动性与图案形成。《物理评论快报》，104(13):138302，2010年。[29] S. W. Park、J. Lee、H. Yoon 和 S. Shin。化学驱过程中多孔介质中盐度驱动采油的微流体研究。《能源与燃料》，35(6):4885–4892，2021年。[30] M. K. Rasmussen、J. N. Pedersen 和 R. Marie。利用盐梯度表征纳米颗粒的尺寸与表面电荷。《自然·通讯》，11(1):1–8，2020年。[31] J.B. Salmon 和 F. Doumenc。液态二元混合物受限干燥过程中的浮力驱动弥散。《物理评论：流体》，5(2):024201，2020年。[32] S. Shim。扩散泳、扩散渗透与微流体学：流动存在时的表面流驱动现象。《化学评论》，122(7):6986–7009，2022年。[33] S. Shin、E. Um、B. Sabass、J. T. Ault、M. Rahimi、P. B. Warren 和 H. A. Stone。通过盲端通道中的溶质梯度实现对胶体输运的尺寸依赖性控制。《美国国家科学院院刊》，113(2):257–261，2016年。[34] S. Shin、J. T. Ault、J. Feng、P. B. Warren 和 H. A. Stone。利用溶质梯度进行低成本ζ电位测量。《先进材料》，29(30):1701516，2017年。[35] S. Shin、J. T. Ault、P. B. Warren 和 H. A. Stone。流体流动和扩散泳诱导的流动汇合处胶体颗粒累积。《物理评论X》，7(4):041038，2017年。[36] S. Shin、O. Shardt、P. B. Warren 和 H. A. Stone。利用二氧化碳实现无膜水过滤。6, 2017 8 1 1 .《自然·通讯》，( ): – 。[37] S. Shin、P. B. Warren 和 H. A. Stone。表面活性剂梯度清洁：多孔材料中的颗粒去除及漂洗在洗涤去污中的重要性。《物理评论应用》，9(3):034012，2018年。

[38] N. Singh、G. T. Vladisavljevi´c、F. Nadal、C. Cottin-Bizonne、C. Pirat 和 G. Bolognesi。稳态溶质梯度下通过扩散泳在微沟槽通道中可逆捕获胶体。《物理评论快报》，125(24):248002，2020。[39] M. Stimson 和 G. B. Jeffery。黏性流体中两个球体的运动。《伦敦皇家学会会刊》，111(757):110–116，1926。[40] H. A. Stone 和 H. Brenner。平均速度沿流向变化的流动中的弥散：径向流。《工业与工程化学研究》，38(3):851–854，1999。[41] G. I. Taylor。可溶物质在缓慢流经管内的溶剂中的弥散。《伦敦皇家学会会刊》，219 203，1953 1137 186( ): – 。[42] I. Williams、S. Lee、A. Apriceno、R. P. Sear 和 G. Battaglia。非电解质浓度梯度诱导的扩散渗透流和对流流动。《美国国家科学院院刊》，117(41):25263–25271，2020。