

耗散粒子动力学处理复杂固体 壁面的一种有效方法*

刘谋斌^{1)2)†} 常建忠³⁾

1)(中国科学院力学研究所水动力学与海洋工程重点实验室,北京 100190)

2)(中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室,北京 100190)

3)(中北大学机电工程学院,太原 030051)

(2010 年 1 月 6 日收到;2010 年 3 月 2 日收到修改稿)

耗散粒子动力学(dissipative particle dynamics, DPD)作为一种介观尺度拉格朗日型粒子方法,已经成功地应用于微纳米流动和生化科技的研究中. 复杂固体壁面的处理和壁面边界条件的实施一直是 DPD 方法发展及应用的一个障碍. 提出了处理复杂固体壁面的一种新的方法. 复杂固体区域通过冻结随机分布并且达到平衡状态的 DPD 粒子代表;所冻结的 DPD 粒子位于临近流动区域的一个截距内;在靠近固体壁面的流动区域中设置流动反弹层,当流动 DPD 粒子进入此流动层后反弹回流动区域. 应用这种固体壁面处理方法对简单流动区域的 Poiseuille 流动和复杂多孔介质内的流动进行了分析. 研究表明,这种新的固体壁面处理方法能够有效模拟复杂固体区域,准确实施壁面边界条件.

关键词: 耗散粒子动力学, 固体边界处理, 介观尺度, 无滑移边界条件

PACC: 0340G, 4710, 4785

1. 引 言

介观尺度流动现象普遍存在于日常生活以及各种工业过程之中,对环境工程、生物化学工程和微纳米科技等不同领域具有重要的意义. 传统的网格方法一般基于连续介质力学假设,当问题所涉及的空间尺度逐渐缩小到介观乃至微观时未必适用. 介观尺度流动问题的研究往往需要多尺度计算模型以研究介观乃至微观尺度的时间和空间流体动力学特征. 分子动力学(molecular dynamics, MD)方法^[1]通过追踪各个分子/原子的运动(位置及动量)对整个流体系统的特性进行准确的模拟. 然而分子动力学模拟所涉及的时间及空间尺度大致为纳秒和纳米级,在现在的计算条件下,很难对介观尺度以上的流动区域进行模拟. 介于纳米与毫米之间的介观尺度模拟方法,是模拟介观尺度多相流动问题的合理选择. 这些方法包括:1) 网格波尔兹曼(lattice Boltzmann method, LBM)^[2], 2) 直接模拟蒙特卡罗

(direct simulation Monte Carlo, DSMC)^[3], 3) 光滑粒子动力学(smoothed particle hydrodynamics, SPH)^[4, 5], 4) 耗散粒子动力学(dissipative particle dynamics, DPD)^[6, 7]. 这些方法特点不同,应用各异. SPH 源于天文物理学用以模拟星系演变,最近被逐步推广到传统连续力学适用的领域,甚至进一步应用于研究微尺度下非连续介质的运动特性. LBM 比较适合模拟具有复杂几何区域、复杂边界的流体流动. DSMC 适用于模拟稀薄气体的特性.

DPD 方法是一种粗粒化的分子动力学方法,每个 DPD 粒子包含一团原子或者分子,可以使用更大的粒子尺寸和更长的时间步长,因此比传统的分子动力学方法更加经济有效,能应用到介观尺度乃至亚宏观的问题^[8]. 近年来,耗散粒子动力学方法日益受到重视,逐渐应用到了各类复杂的流体流动,如相分离^[7]、蛋白质等大分子悬浮^[9]、表面活性剂^[10, 11]、胶体输运^[12, 13]、稀释聚合物溶液^[14]、生物薄膜^[15]、以及介观尺度的多相流动现象^[16-19].

* 国家自然科学基金(批准号:10942004, 50976108)资助的课题.

† E-mail: liumoubin@imech. ac. cn

在传统的网格方法中, 固体边界区域能够准确描述, 壁面边界条件一般能够精确实施^[20-23]. 在 DPD 方法中, 粒子代表所模拟的介质, 并随物质的运动以当地速度移动. 壁面边界条件很难严格、精确实施. 目前 DPD 方法大多基于周期性边界条件, 用于研究简单区域中复杂流体的流动现象. 传统 DPD 方法把规则分布的 DPD 粒子冻结在固体边界上代表固体壁面. 结合不同反弹形式实施对应的壁面边界条件^[24, 25]. 流动 DPD 粒子达到固体壁面后反弹回流动区域的形式包括:

1) 镜面反射 (mirror reflection): 流动 DPD 粒子从固壁反弹到流动区域前后粒子法向速度大小相等, 方向相反; 切向速度大小相等, 方向相同. 因此镜面反射在固体壁面上实施的是滑移 (slip) 边界条件.

2) 弹跳反射 (bounce-back reflection): 流动 DPD 粒子从固壁反弹到流动区域前后粒子速度大小相等, 方向相反.

3) 麦克斯韦反射 (Maxwellian reflection): 流动 DPD 粒子从固壁反弹到流动区域后粒子速度满足麦克斯韦分布.

可以把上述三种壁面反弹形式结合起来形成新的壁面处理方法. 例如流动 DPD 粒子从固壁反弹到流动区域后粒子法向速度大小重新设置, 满足麦克斯韦分布, 方向相反; 而切向速度大小不变, 方向相反^[26].

早期 DPD 方法一般在固体壁面上仅使用一层规则分布的 DPD 粒子. 因为 DPD 方法使用软球形式的作用势, 一层边界 DPD 粒子不足以阻止某些流动 DPD 粒子穿透固体壁面, 随后一些研究人员开始使用两层 (或多层) DPD 粒子规则分布在边界区域上用以模拟固体边界 (图 1). 这两层边界 DPD 粒子布置在固体边界上和离固体边界一个 DPD 截距的位置上^[27]. 可以通过调整这两层边界 DPD 粒子的位置更好地实施固体壁面边界条件^[28]. 这种在边界区域设置规则分布 DPD 边界粒子的方法容易实施, 对于简单区域比较有效, 当所研究的问题涉及复杂的固体边界和流动区域时很难适用.

本文提出了处理固体壁面的一种新的方法, 并对简单流动区域的 Poiseuille 流动和复杂多孔介质内的流动进行了 DPD 模拟. 具体的分析和数值验证表明, 这种固体壁面处理方法能够准确实施壁面边界条件, 有效模拟复杂固体区域.

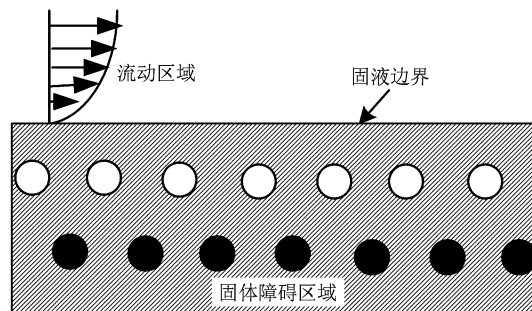


图 1 两层边界 DPD 粒子规则分布, 结合合适的反弹形式, 进行固体边界处理

2. DPD 方法基本思想

在耗散粒子动力学模型中, 流体系统由一系列介质相同的粒子组成. 这些粒子并非单个分子, 而是由若干个分子组成. 组成粒子的分子数目的多少与粒子大小、实际计算区域的几何尺寸、以及计算时间等密切相关. 如果组成粒子的分子数目很少, DPD 模型只能模拟较小的区域. 极端的情形是粒子由单个分子构成, 这时 DPD 模型实际上就是带软作用力的分子动力学模型. 而如果组成粒子的分子数目很多, DPD 模型能够充分发挥其优势, 模拟较大的区域. 因此耗散粒子动力学方法可以被视为一种粗粒化的分子动力学方法.

与分子动力学模型类似, 牛顿运动方程描述了 DPD 模型中 DPD 粒子的运动

$$\frac{dr_i}{dt} = v_i, \frac{dv_i}{dt} = f_i = f_i^{\text{int}} + f_i^{\text{ext}}, \quad (1)$$

式中 r_i 和 v_i 分别是位置和速度矢量; f_i^{ext} 是外力 (如重力等); f_i^{int} 是可叠加的粒子-粒子间两两相互作用力, 包括保守力 F_{ij}^C (或守恒力)、耗散力 F_{ij}^D 以及随机力 F_{ij}^R ,

$$f_i^{\text{int}} = \sum_{j \neq i} F_{ij} = \sum_{j \neq i} F_{ij}^C + F_{ij}^D + F_{ij}^R, \quad (2)$$

式中 F_{ij} 是粒子 j 施加在粒子 i 上的作用力. F_{ij} 与 F_{ji} 大小相等, 方向相反, 从而保证了 DPD 模型中动量的严格守恒. 粒子-粒子间的两两相互作用力局限在有限的截距 r_c 内, 而 r_c 往往可取为 DPD 模型中无量纲的单位长度.

保守力 F_{ij}^C 是一种沿粒子-粒子中心的软作用力, 可表示为

$$F_{ij}^C = a_{ij} w^C(r) \hat{r}_{ij}, \quad (3)$$

式中 a_{ij} 为保守力系数, 它所描述的是粒子 i 与 j 间相互作用的保守力的强度. $\mathbf{r}_{ij} (= \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)$ 为方向矢量, 其模为 $r = r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$. $\hat{\mathbf{r}}_{ij} (= \mathbf{r}_{ij}/r_{ij})$ 为单位矢量. $w^c(r_{ij})$ 为保守力权函数, 一般取为 $1 - r$.

耗散力 \mathbf{F}_{ij}^D 可表示为

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma w^D(r_{ij}) (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (4)$$

式中 γ 为耗散力系数, 描述了粒子 i 与 j 间相互作用的耗散力强度. $\mathbf{v}_{ij} (= \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j)$ 为速度矢量. $w^D(r_{ij})$ 为耗散力权函数. 由(4)式可见, 耗散力由粒子间的相对位置和相对速度共同决定.

随机力 \mathbf{F}_{ij}^R 可表示为

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \sigma w^R(r_{ij}) \xi_{ij} \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (5)$$

式中 σ 为随机力系数, 描述了粒子 i 与 j 间相互作用的耗散力强度. $w^R(r_{ij})$ 为随机力权函数. 耗散力和随机力也是沿粒子-粒子中心的作用力, 这确保了 DPD 模型的线动量的守恒. ξ_{ij} 为随机变量, 一般具有高斯分布、平均值为零且方差为 Δt^{-1} (Δt 为推进牛顿方程时间积分的时间步长).

(4)式中负号表明, 耗散力方向与粒子间相对运动的方向相反, 因此减弱粒子间相互作用. 其直接结果是减少系统的动能, 降低系统的温度. 而随机力引起粒子间的随机振动, 增加系统的动能, 提高系统的温度. 耗散力和随机力的相互作用, 在满足一定条件下, 能使整个系统温度维持在基本恒定的水平上. 因此耗散粒子动力学方法实际上就是粗粒化、恒温、以及含软作用力的分子动力学方法. 保持系统恒温的条件可以从对系统的热力学平衡学的统计分析得到^[29]. 对温度为 T 的 DPD 流体系统, 为了维持系统温度不变, 耗散力系数和随机力系数,

以及耗散力权函数和随机力权函数必须满足以下关系:

$$\gamma = \frac{\sigma^2}{2k_B T}, \quad (6)$$

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2 = (1 - r)^2, \quad (7)$$

(6)式中, k_B 为波尔兹曼常数. DPD 模型中相互作用能量用 $k_B T$ 表示, 而 $k_B T$ 往往取整为 1. (7)式中, 耗散力权函数和随机力权函数比较常用的形式为

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2 = \begin{cases} (1 - r)^2, & r < 1, \\ 0, & r \geq 1. \end{cases} \quad (8)$$

3. 边界处理方法

在 DPD 数值模拟中, 固体边界处理有三方面的要求: 1) 精确实施固体壁面无滑移条件, 2) 尽量降低靠近固体壁面的流动区域中的温度扰动以及其他参数因此产生的波动, 3) 防止流动 DPD 粒子非物理性地穿透固体边界. 对于复杂区域的流动问题, 固体边界处理还应该满足对复杂边界的适应性和计算效率方面的要求.

本文提出了一种新的边界处理方法, 能够适用于涉及复杂固体障碍区域的流动问题. 这种新的边界处理方法包括六步:

1) 把整个计算区域(包括流动区域和固体障碍区域)用规则背景网格覆盖, 网格单元间距为 DPD 模拟中的截距 r_c (图 2). 流动区域中网格种类标识为“0”, 而固体障碍区域中网格种类标识为“1”.

2) 根据所需的粒子密度在计算区域中随机布

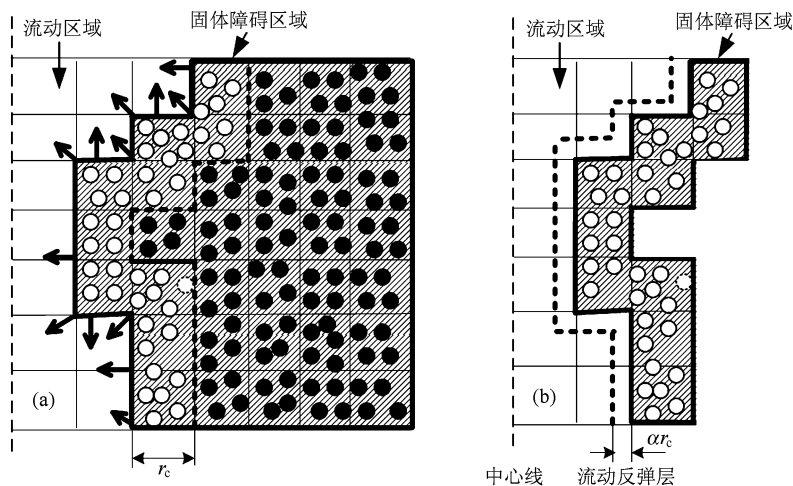


图 2 边界处理方法示意图 (a) 计算区域; (b) 边界粒子与流动反弹层

置 DPD 粒子, 并进行 DPD 计算, 使整个系统达到平衡状态.

3) 冻结固体障碍区域中 DPD 粒子, 考虑到 DPD 计算中粒子-粒子间相互作用局限于一个截距内, 只有临近固液边界一个截距内的 DPD 边界粒子(图 2 中空心粒子)与流动区域中流动 DPD 粒子相互作用, 因而予以保留; 固液边界一个截距外的 DPD 粒子(图 2 中实心粒子)因不参与流动区域中流动 DPD 粒子相互作用而去除. 当计算区域中固体障碍区域较多时, 这样处理可以大幅度减少计算时间, 提高计算效率.

4) 根据每个边界 DPD 粒子所处网格及邻近网格种类计算粒子的法线方向及切线方向, 法向及切向均指向流动区域内部.

5) 在临近固液边界的流动区域中设置流动反弹层, 厚度为 αr_c , α 为可调参数.

6) 当流动 DPD 粒子进入流动反弹层后切向速度大小不变, 方向相反, 从而实施无滑移边界条件; 粒子法向速度方向与原速度法向相反, 大小根据给定系统温度重新设置, 满足麦克斯韦分布, 从而减小边界区域温度扰动.

和传统的 DPD 边界处理方法相比, 这种新的边界处理方法具有三个优点:

1) 新的边界处理方法可以采用随机分布的粒子作为边界粒子, 能够方便地表征复杂流动区域.

2) 新的边界处理方法结合无规则分布的边界粒子和流动反弹层, 可以确保流动 DPD 粒子不穿透固体壁面.

3) 新的边界处理方法中边界粒子密度与流动区域中流动粒子密度一致, 流体粒子反弹时流动 DPD 粒子法向速度根据系统温度给定重新设置, 满足给定麦克斯韦分布, 因此固液边界区域温度扰动以及所导致的其他参数的波动大幅度减弱.

4. 计算结果与分析

4.1. Poiseuille 流动模拟

经典 Poiseuille 流动问题涉及两无限长平板间流体流动现象. 因为 Poiseuille 流动问题具有理论解^[30], 所以通常被用来检验新的数值模型. 在 Poiseuille 流动模型中, 流体在两块平行且无限长的固定平板间流动. 初始静止的流体由于受到体力

(例如压力梯度或外力)的作用而在两平板间逐渐流动, 最终达到稳定状态.

DPD 作为一种介观尺度计算方法, 可以用来研究包括 Poiseuille 在内的流动问题的动力学特性. 当所使用的时间积分格式中时间步长足够小而所模拟的系统尺寸足够大时, DPD 方法模拟所得计算结果应该满足 Navier-Stokes (N-S) 方程. 通过研究 Poiseuille 流动问题, 一方面可以通过评估流动行为是否与 N-S 解相吻合从而验证 DPD 方法及所开发的程序的有效性和准确性; 另一方面可以通过分析边界区域流动特性从而确认边界处理方法的有效性和准确性.

在 Poiseuille 流动的 DPD 模拟中, 流动区域在 x, y, z 三个方向分别为 60, 3, 40. x 和 y 方向施加周期性边界条件, 而 z 方向布置边界粒子模拟固体边界. x 方向施加的无量纲外力为 0.02, 用以驱动初始静止的流体 DPD 粒子运动. 计算过程中所使用的 DPD 粒子密度为 4, 系统温度 $k_B T$ 为 1. DPD 模型中的保守力系数 a , 可以通过 DPD 流体的状态方程确定. 为了使 DPD 流体能够与典型的流体(如水)相对应, DPD 流体的密度涨落也应该对应于真实流体. Groot 和 Warrant^[7]通过研究 DPD 流体的可压缩性与状态方程发现, 对中等密度的 DPD 流体, 保守力系数 a 与系统温度成正比, 与粒子密度成反比, 即 $a \approx 75 k_B T / \rho$. 因此粒子密度为 4 的系统所对应的流体 DPD 粒子间相互作用的保守力系数 a 为 18.75. 另外根据(6)及(7)式, 随机力与耗散力相互关联. 确定其中一个即可. Groot 和 Warrant^[7]发现, 当随机力系数 σ 为 3.0 时, 在温度区间 $k_B T = 1-10$ 内, 系统弛豫快捷合理, 能得到可靠的模拟结果. 因此本文中随机力系数 σ 为 3.0, 根据(6)式, 对应的耗散力系数 γ 为 4.5. 本文使用修正的 velocity-Verlet 算法^[16]进行时间积分, 时间步长为 0.02. 在计算结果的处理方面, 计算区域中在 z 方向使用了 200 个格子, 每 400 个时间单位对各格子的流动参数进行抽样平均, 所得到的结果能够精确反映局部位置各种参数的变化及波动情况.

根据给定的粒子密度和流动区域的大小, 流动区域的 DPD 粒子数为 21600. 为了实施无滑移边界条件, 需要在边界区域布置 DPD 粒子, 边界粒子密度设定为与流动粒子密度一致, 布置在 z 方向流动区域外 1.5 个单位长度内, 因此边界 DPD 粒子数为 2160. 图 3 显示了边界粒子按照 FCC (face-centered

cubic)方式分布规则粒子的情形,图4显示了边界粒子随机分布的情形.在DPD计算中,流体DPD粒子与边界DPD粒子间相互作用力的强度系数与流体粒子间相互作用力系数一致.

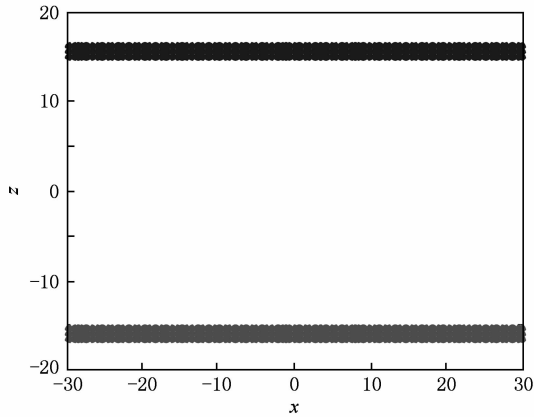


图3 边界DPD粒子规则分布

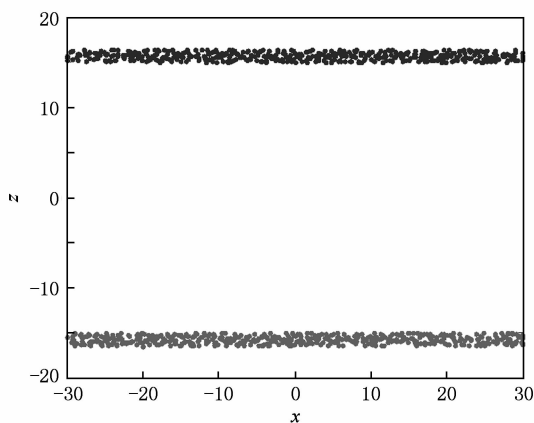


图4 边界DPD粒子随机分布

图5显示了在粒子规则(直线)和随机分布(空心圆)两种情形下DPD模拟所得到的温度和粒子密度沿高度方向(z)的分布情况.温度曲线与给定的系统温度非常符合,波动微小.粒子密度曲线在流动区域内部与给定的初始粒子密度一致,在边界局部区域有波动.边界局部区域粒子密度的波动在各种DPD文献中是一个非常普遍的现象,并且受到广泛关注.研究表明固体边界局域流动参数的波动与流体DPD粒子和边界DPD粒子间相互作用力系数、边界粒子的位置和布置方式、边界粒子与流体粒子的密度比、DPD计算中使用的截距等因素密切相关.本文中流动区域和边界区域粒子密度一致,流动粒子与边界粒子间作用力系数一致,DPD计算

中截距为单位DPD长度.在两种粒子分布情形下所得到的粒子密度分布曲线和其他文献中DPD结果相比都在较小的范围内.另外,当流动DPD粒子进入临近固液边界流动反弹层时,反弹进入流动区域.固液边界区域流动反弹层厚度 αr_c 也影响流动参数的波动和整体流动特征.当流动反弹层厚度非常大时($\alpha > 0.5$),流动粒子还未靠近固液边界就反弹进入中间流动区域,能够非常有效地防止流动粒子穿透固体边界;但是较厚的流动反弹层导致固液边界区域流动粒子非常少,边界区域粒子密度波动较大;固体壁面条件的影响不能很好的传递到中间流动区域,影响整体流动特性.当流动反弹层厚度非常小时($\alpha < 0.05$),流动反弹层占整体流动区域中非常小的部分,对中间流动区域的整体流动特性影响较小,边界区域粒子密度波动也不大;但是因为流动反弹层很薄,部分流动DPD粒子可能直接从中间流动区域进入固体边界区域.研究表明,当 α 介于0.06和0.1之间时,一方面能够有效防止流动粒子非物理性地穿透固体边界,另一方面对中间流动区域的整体流动形态影响可以忽略不计,固体边界附近局部区域的流动参数波动也非常小.另外,本文DPD模型中的流动反弹层,作为一种数值技巧,目的在于处理复杂固壁边界并准确实施边界条件.与连续力学领域流动边界层理论类似.在宏观流动问题中,边界层越薄,固壁边界的影响越快传递到流体内部.在DPD模型中,流动反弹层越薄,固壁边界的影响也越快传递到流体内部.

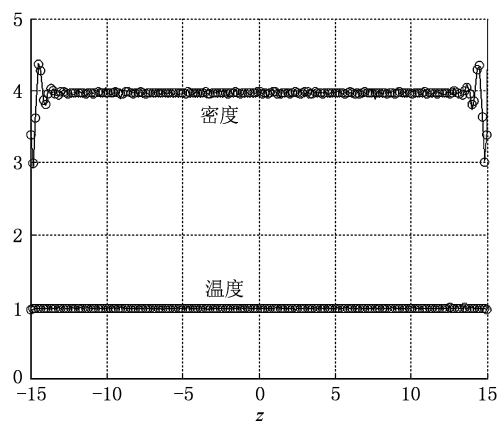


图5 沿高度方向(z)温度与密度分布

图6显示了粒子规则(实线)和随机分布(空心圆)两种情形下DPD模拟所得到的水平方向(x)速度沿高度方向(z)的分布情况.在两种粒子分布情

形下,采用新的边界处理方法得到的速度分布与 N-S 方程解析解(方形)完全一致,在固体壁面附近速度基本趋近于零,无滑移边界条件得到很好的实现.

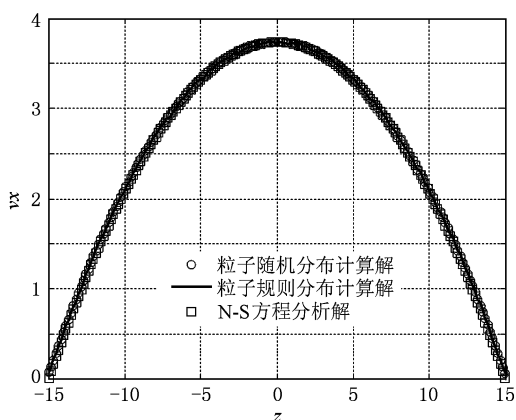


图6 沿高度方向(z)水平(x)速度分布

4.2. 多孔介质流动模拟

这一算例涉及多孔介质中流体流动. 如图7所示,计算区域大小在 x, y 和 z 方向为 $160 \times 2 \times 160$, 固体障碍(阴影部分)占整个计算区域的 55.7%, 孔隙(空白部分)率为 44.3%. 多孔介质中固体障碍大小不同、位置各异. 在计算区域的中部有一个较大的裂缝空隙,流体从左边流入,右边流出. x, y 和 z 方向施加周期性边界条件,而在多孔介质的固体障碍上施加固体边界条件. 传统的 DPD 方法一般利用一层或多层规则分布的边界粒子,在简单区域实施固体边界条件. 对于如图7所示的复杂区域,则很难在固体障碍区域布置规则分布的一层或多

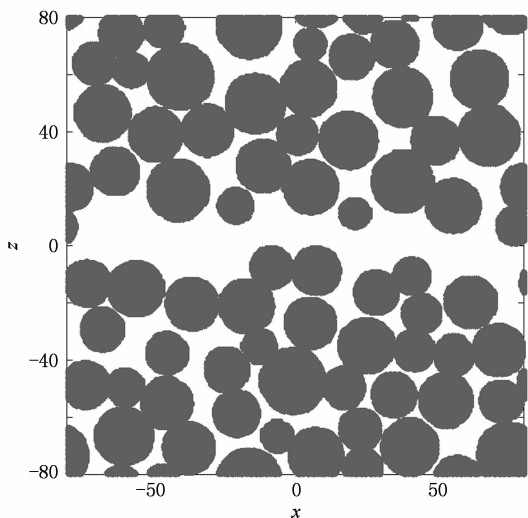


图7 多孔介质固体障碍与流动区域分布

层边界粒子.

应用本文提出的固体边界处理方法,可以对此复杂多孔介质流动进行模拟. 首先在整个计算区域中根据给定粒子密度和计算区域大小随机投射 DPD 粒子,并对系统进行 DPD 模拟达到平衡状态后,把固体障碍区域中临近流动区域一个截距内的 DPD 粒子冻结起来(图8),用以模拟固体边界并实施相应的无滑移边界条件;流动区域的 DPD 粒子则用来进行下一步的计算. 当给定的粒子密度为 4 时,所得到的流体和边界 DPD 粒子分别为 90768 和 31774,边界 DPD 粒子仅占总粒子数的 25.9%. 图7所示多孔介质经过上述处理后计算时间可以大幅度减少.

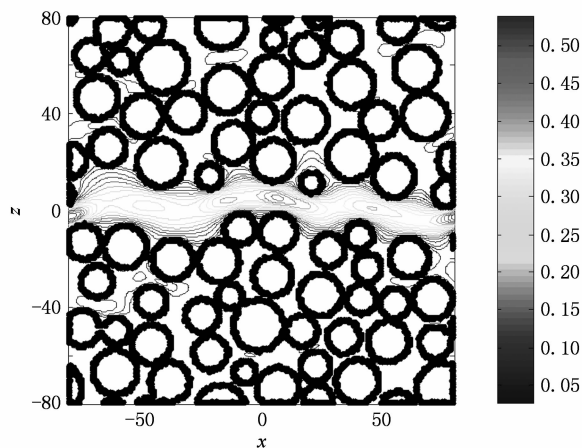


图8 多孔介质流动 DPD 模拟所得到的速度分布

确定了边界和流体 DPD 粒子后,可以对图7所示多孔介质中的流体流动进行 DPD 模拟. 在 x 方向施加的无量纲外力为 0.01,用以驱动初始静止的流体 DPD 粒子运动. 计算过程中所使用的 DPD 粒子密度为 4,所对应的流体 DPD 粒子间相互作用的保守力 a 为 18.75;随机力系数 σ 为 3.0,系统温度 $k_B T$ 为 1,对应的耗散力系数 γ 为 4.5. 使用修正的 velocity-Verlet 算法进行时间积分,时间步长为 0.02. 在计算结果的处理方面,计算区域中在 x 和 z 方向使用了 160 个格子,每 400 个时间单位对每个格子的流动参数进行抽样平均. 流动反弹层厚度系数 α 取为 0.10.

图8显示了多孔介质中流体流动 DPD 模拟所得到的速度分布. 在水平中心附近的裂缝空隙中,流动比较畅通,流速较大;而在其他区域因为固体障碍层层叠叠,严重影响了流体流动行为,在很多孔隙区域流动趋于滞止. 另外,可以看出,每个固体

障碍附近流动速度趋近于零,无滑移边界条件得到很好的实施.

图 9 显示了系统总体温度随时间变化曲线. 系统温度随时间的变化曲线是 DPD 模拟中一个重要的指标:如果系统温度严重偏离给定温度,所得到的计算结果将不可靠. 图 8 显示,随着计算时间的推进,系统总体温度在初始给定温度附近波动,波动幅度小于 3.5%.

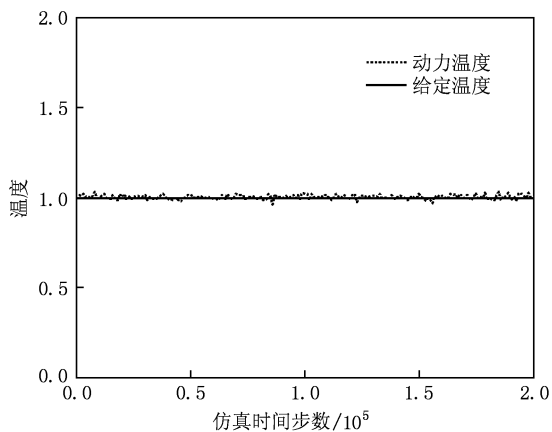


图 9 系统总体温度随时间变化曲线

图 10 给出了裂缝空隙水平中心线上速度大小分布曲线. 比较研究了 DPD 计算结果和有限容积方法 (finite volume method, FVM) 得到的计算结果. 与传统方案不同,本文应用 FVM 直接求解 Navier-Stokes,并考虑到多孔介质具体的形状及分布,多孔介质区域作为固体障碍,通过对多孔介质复杂固壁边界处理,精确模拟多孔介质流动间隙中的流体流动规律. 所得到的结果比基于简化模型以及渗透率的传统方案所得到的结果更为精细和可靠. 另外,FVM 模型中真实流体为水,DPD 模型中,保守力、耗散力及随机力系数的选取对应于真实流体(水). 图 10 表明应用 DPD 模型所得到的计算结果和有限容积方法得到的计算结果非常接近,这也进一步显示了 DPD 模拟及边界处理方法的准确性和

有效性.

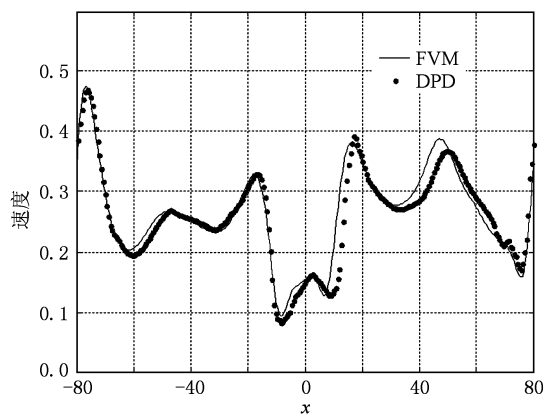


图 10 水平中心线上速度大小曲线

5. 结 论

固体障碍的处理和固壁边界条件的实施长期以来一直是耗散粒子动力学 DPD 方法的一个重要研究课题. 本文提出了一种新的固体边界处理方法,可以对复杂区域的流体流动行为有效地进行模拟. 复杂固体区域通过冻结随机分布并且达到平衡状态的 DPD 粒子代表;所冻结的 DPD 粒子位于临近流动区域的一个截断距离内;在靠近固体壁面的流动区域设置流动反弹层,当流动 DPD 粒子进入此流动反弹层后反弹回流动区域,粒子切向速度大小不变,方向相反,从而实施无滑移边界条件;粒子法向速度方向与原速度法向相反,大小根据给定系统温度重新标定,满足麦克斯韦分布,能够减小边界区域温度扰动. 简单区域中 Poiseuille 流动的研究表明,对于边界粒子规则或者随机分布的情形,这种新的边界处理方法都能够很好地实施无滑移边界条件,壁面附近流动参数波动不大. 对于复杂区域流动问题,这种新的边界处理方法也能够得到满意的结果.

- [1] Rapaport D C 2004 *The art of molecular dynamics simulation* (Cambridge, UK: Cambridge University Press) P11
- [2] Chen S, Doolen G D 1998 *Annu. Rev. Fluid Mech.* **30** 329
- [3] Oran E S, Oh C K, Cybyk B Z 1998 *Annual Review of Fluid Mechanics* **30** 403
- [4] Gingold R A, Monaghan J J 1977 *Mon. Not. R. Astron. Soc.*

181 375

- [5] Liu M B, Chang J Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3654 (in Chinese) [刘谋斌、常建忠 2010 物理学报 **59** 3654]
- [6] Hoogerbrugge P J, Koelman J 1992 *Europhys. Lett.* **19** 155
- [7] Groot R D, Warren P B 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 4423
- [8] Chen S, Zhao J, Fan X J, Wang D 2006 *Bull. Sci. Tech.* **22**

- 596 (in Chinese) [陈 硕、赵 钧、范西俊、王 丹 2006 科技通报 **22** 596]
- [9] Fan X, Phan-Thien N, Yong N T, Wu X, Xu D 2003 *Phys. Fluids* **15** DOI: 10.1063/1.1522750
- [10] Groot R D 2003 *J. Chem. Phys.* **118** 11265
- [11] Groot R D 2000 *Langmuir* **16** 7493
- [12] Dzwiniel W, Yuen D A, Boryczko K 2002 *J. Mol. Model.* **8** 33
- [13] Tanaka H, Araki T 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 1338
- [14] Schlijper A G, Hoogerbrugge P J, Manke C W 1995 *J. Rheol.* **39** 567
- [15] Venturoli M, Smit B 1999 *PhysChemComm* **2** 45
- [16] Liu M B, Meakin P, Huang H 2006 *Phys. Fluids* **18** 017101
- [17] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *Water Resour. Res.* **43** w04411
- [18] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *J. Comput. Phys.* **222** 110
- [19] Chang J Z, Liu M B, Liu H T 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3954 (in Chinese) [常建忠、刘谋斌、刘汉涛 2008 物理学报 **57** 3954]
- [20] Zhang A M, Yao X L 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1662 (in Chinese) [张阿漫、姚熊亮 2008 物理学报 **57** 1662]
- [21] Liu H T, Tong Z H, An K, Ma L Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6569 (in Chinese) [刘汉涛、全志辉、安 康、马理强 2009 物理学报 **58** 6369]
- [22] Zhang A M 2008 *Chin. Phys. B* **17** 927
- [23] Sun Z H, Han R J 2008 *Chin. Phys. B* **17** 3185
- [24] Revenga M, Zuniga I, Espanol P 1998 *Int. J. Mod. Phys. C* **9** 1319
- [25] Revenga M, Zuniga I, Espanol P 1999 *Comput. Phys. Commun.* **121** 309
- [26] Wang L, Ge W, Li J 2006 *Comput. Phys. Commun.* **174** 386
- [27] Willemsen S M, Hoefsloot H C J, Iedema P D 2000 *Int. J. Mod. Phys. C* **11** 881
- [28] Duong-Hong D, Phan-Thien N, Fan X 2004 *Comput. Mech.* **35** 24
- [29] Espanol P, Warren P 1995 *Europhys. Lett.* **30** 191
- [30] Liu G R, Liu M B 2003 *Smoothed particle hydrodynamics: A meshfree particle method* (Singapore: World Scientific) P150

A new boundary treatment algorithm for dissipative particle dynamics

Liu Mou-Bin^{1)2)†} Chang Jian-Zhong³⁾

1) (Key Laboratory for Hydrodynamics and Ocean Engineering, of Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

2) (The State Key Laboratory for Nonlinear Mechanics, of Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

3) (School of Mechatronic Engineering, North University of China, Taiyuan 030051, China)

(Received 6 January 2010; revised manuscript received 2 March 2010)

Abstract

Dissipative particle dynamics (DPD) is a meso-scale, Lagrangian particle method, and has been successfully applied to different areas including micro- and nano-fluidics, bio- and chemical technologies. The treatment of solid matrix and the implementation of solid boundary conditions have been an important task for the development and application of the DPD method. This paper presents a new method of treating complex solid boundary. Solid grains in complex flow geometry can be represented by freezing randomly distributed DPD particles which have reached an equilibrium state. To increase computational efficiency, only the boundary DPD particles within one cut-off distance from the flow region are frozen. A thin layer in the flow region next to the solid boundary is used to bounce mobile DPD particles in this layer back to the flow region. The DPD method and this new boundary treatment algorithm are used to model the Poiseuille flow and a flow problem in a complex porous media. It is demonstrated that this new boundary treatment algorithm can effectively model complex solid matrix and correctly implement non-slip boundary condition.

Keywords: dissipative particle dynamics, solid boundary treatment, meso-scale, non-slip boundary condition

PACC: 0340G, 4710, 4785

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10942004, 50976108).

† E-mail: liumoubin@imech.ac.cn