

微流体中颗粒动力学的高效并行模拟

蒋玺恺

(中国科学院力学研究所非线性力学国家重点实验室, 北京市海淀区 100190)

摘要 微流体中颗粒的运动在自然界和工程技术中有着广泛的应用, 比如微生物、聚合物、蛋白质等物质在生物体内的运输。微流动的雷诺数非常小, 也被称为斯托克斯流。斯托克斯流中颗粒间的水力相互作用是长程作用力, 每对颗粒间的水力相互作用力随颗粒间距(r)呈 $1/r$ 衰减。对多颗粒系统, 使用格林函数法直接计算所有颗粒间水力相互作用的计算量与颗粒个数的二次方成正比。本文介绍一种数值方法, 用于高效模拟斯托克斯流中颗粒的定向和布朗运动。对于颗粒间的水力相互作用, 本文使用类 Ewald 方法将其分解为局部和全局两项分别计算。局部项采用格林函数法计算, 全局项采用并行有限元方法计算。类 Ewald 方法中的 α 参数控制局部和全局两项的计算量, 优化 α 可提高计算效率。颗粒布朗运动的随机偏微分方程采用 Fixman 中点格式进行时间推进, 避免了对扩散张量求偏微分的计算。颗粒的随机运动与流体的扩散张量通过涨落-耗散定理相关联, 本文采用 Chebyshev 多项式近似方法来计算扩散张量的平方根, 并用之计算颗粒的布朗位移。在计算 Chebyshev 多项式时, 使用了并行求解器计算扩散张量的特征值。通过算例, 验证了该算法的可靠性, 并研究了颗粒在多种微流系统中的运输问题。

关键词: 斯托克斯流 布朗运动 随机过程 类 Ewald 方法 有限元 并行计算

一、引言

颗粒在微流体中的定向和布朗运动在生物和化工等领域有非常重要的应用, 其中蕴含了丰富的运输现象和物理机理^[1]。数值模拟作为一种重要的研究方法, 可以从机理上帮助理解含颗粒微流动中的流体力学现象。随着超级计算机的不断发展, 数值模拟所研究系统的规模逐渐增大。对于含颗粒微流动的数值模拟, 其中所需要处理的颗粒个数越来越多, 并且颗粒和微流通道的几何形状通常为不规则。因此, 亟需发展一套高效模拟任意几何形状微流通道中任意几何形状颗粒运动的方法与并行计算平台。

二、微流体中颗粒动力学的模拟

2.1 微流体与颗粒的运动方程

微流动的雷诺数非常小 ($Re \ll 1$), 假设为准静态的不可压缩流, 忽略惯性项的影响, 流体的动量和质量守恒方程简化为^[1]

$$-\nabla p + \mu \nabla^2 \mathbf{u} = -\boldsymbol{\rho} \quad (1)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (2)$$

其中 p 是压强, μ 是流体的动力粘度, \mathbf{u} 是流体的速度, $\boldsymbol{\rho}$ 是作用在流体上的力。由于斯托克斯方程是线性方程, 使用类 Ewald 方法^[2]将颗粒作用在流体上的力分解为局部和全局两项。局部项作用力导致的颗粒速度采用格林函数法求解, 全局项作用力导致的颗粒速度采用并行有限元方法求解^[3]。颗粒的随机运动偏微分方程为

$$d\mathbf{R} = \left[\mathbf{U}_0 + \mathbf{M} \cdot \mathbf{F} + \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \cdot \mathbf{D} \right] dt + \sqrt{2\mathbf{B}} \cdot d\mathbf{W} \quad (3)$$

其中是 \mathbf{R} 颗粒的位置, \mathbf{U}_0 是颗粒位置处流体的无扰动速度, \mathbf{M} 是迁移率张量, \mathbf{F} 是作用

在颗粒上的外力， D 是扩散张量， B 满足 $D = B \cdot B^T$ ， dW 是满足高斯分布（均值为 0，方差为 dt ）的随机向量。在公式（3）中， $M \cdot F$ 是颗粒在外力作用下的运动速度，它考虑了颗粒间的水力相互作用；对扩散张量的导数是漂移速度，它是由限域空间内与系统构型相关的颗粒迁移率的不均一性所产生的，此为第一扩散项；最后一项是布朗位移，此为第二扩散项。颗粒的运动方程（3）采用 Fixman 中点格式进行时间推进，此方法避免了对扩散张量直接求偏导的计算^[4]。

2.2 数值实验

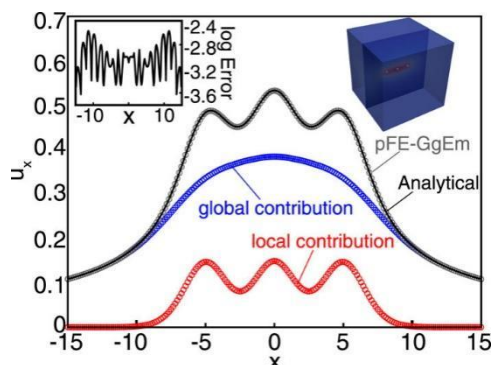


图1 三个颗粒运动所导致的流体流速数值解与解析解对比图

使用以上算法，我们首先计算了三个颗粒在外力作用下运动所导致流体的 x 方向流速随空间的分布，三个颗粒上的外力大小相等，方向都指向 x 正方向。图 1 中的蓝色曲线为全局解，红色曲线为局部解，全局解和局部解相加得到流体总流速（黑色曲线），图 1 中的黑色曲线表明数值解与解析解吻合良好。图 1 中的插图是数值解的绝对误差随空间位置的变化。

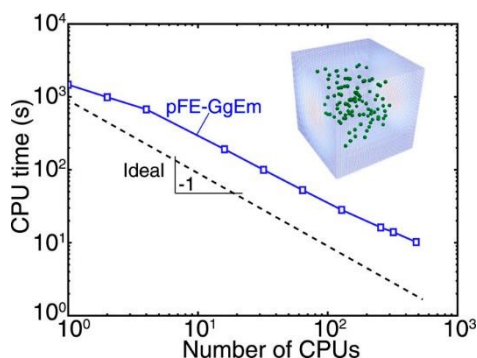


图2 计算100个颗粒运动一个时间步的并行效率

图 2 中的蓝色曲线展示了 100 个颗粒运动一个时间步所需计算时间随 CPU 个数的变化，黑色曲线为理想状态下的情况。此算例中流体有限元离散的自由度约为 300 万，使用的 CPU 个数分别为 1、2、4、16、32、64、128、256、512，计算结果表明该方法展现出良好的强可扩展性（strong scaling）。

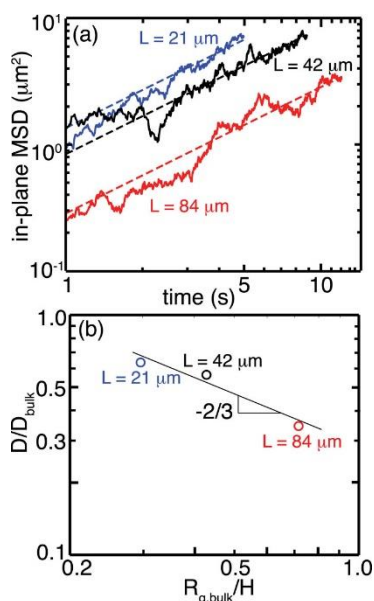


图3 DNA分子在两平行平板间扩散的均方位移 (a) 和自扩散系数随回转半径的变化 (b)

我们计算了三种不同长度 (21、42、84 微米) 的 DNA 聚合物在两平行平板间做布朗运动自扩散时的均方位移, 图 3 (a) 表明数值模拟结果 (实线) 与实验数据 (虚线) 吻合良好。还计算了三种不同长度 DNA 的面内自扩散系数随它们回转半径 (radius of gyration) 的变化, 图 3 (b) 表明数值模拟结果 (圆点) 与聚合物的经典标度率 (直线) 吻合良好。

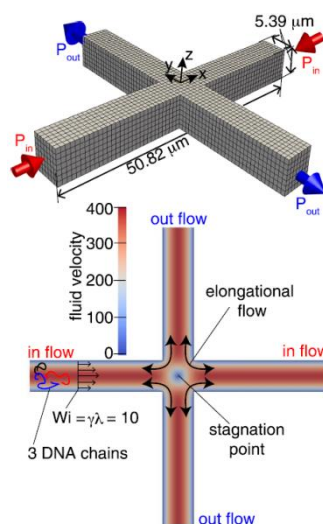


图4 DNA分子在十字交叉流中运动的计算域示意图和流速分布图

我们还模拟了 DNA 分子在十字交叉流中的拉伸动力学。图 4 展示了有限元网格离散后的计算域示意图和十字交叉流中的流速分布图。十字交叉通道的中心点为驻点, 该点处流体流速为零, 通道壁面施加了无滑移边界条件, 流体从通道横向的两端流入, 从纵向的两端流出, 三个 DNA 分子在左侧的通道入口处释放。图 5 展示了 DNA 分子

在十字交叉流中运动时其拉伸长度随时间和空间位置的变化规律。模拟结果表明，DNA 分子越靠近中心驻点，其拉伸长度越长。

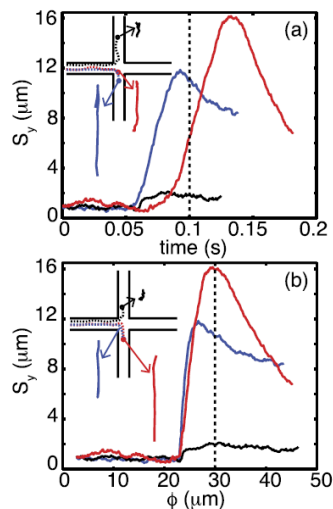


图5 DNA 分子在十字交叉流中运动时其拉伸长度随时间和空间位置的变化

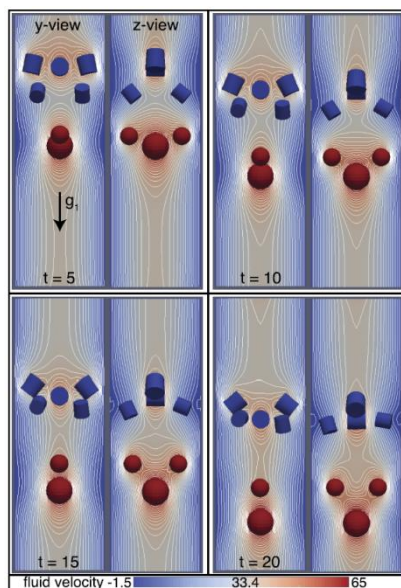


图6 不同大小的圆球与圆柱颗粒在矩形通道中的沉降

对于颗粒的沉降，我们模拟了十个不同大小的圆球和圆柱颗粒在矩形微流通道中的沉降。图 6 展示了不同时刻颗粒的位置与构型以及流体流速分布情况。模拟结果表明，通道中心处的颗粒沉降速度最快，主要原因是通道中心颗粒的迁移率最大；近壁面处的圆柱形颗粒在沉降过程中会呈现出翻滚的运动模式，这是由壁面附近颗粒迁移率的不均匀性所导致的。

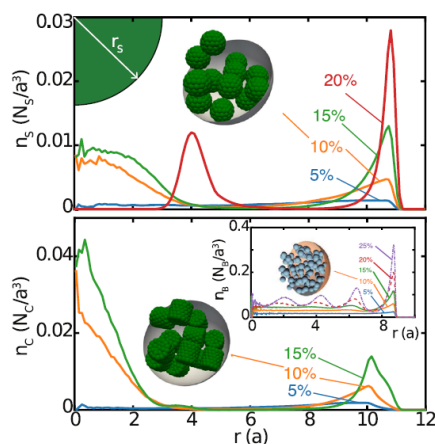


图7 球腔内微流体中不同浓度圆球与圆柱颗粒的数密度随径向位置的变化

我们还研究了球腔内微流体中颗粒的结构和扩散^[5,6]。图 7 表明，当颗粒浓度较低时，远离壁面处的颗粒为均匀分布；当颗粒浓度较高时，近壁面会形成颗粒的层状聚集。在 Lennard-Jones 势能影响下颗粒无法接触壁面，最大数密度出现在 $r=10.5$ 左右（近壁面）。随着颗粒浓度升高，近壁面数密度显著提升。当圆球颗粒体积分数为 20% 时，由于球腔中心没有足够空间容纳颗粒，颗粒数密度会出现两个峰（层状分布）。如果考虑点颗粒，颗粒仅受长程水动力学相互作用和排斥力作用，在浓度较高时也会形成层状结构。

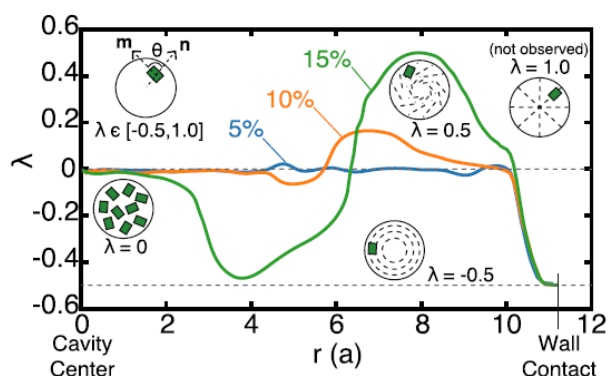


图8 球腔内微流体中不同浓度圆柱颗粒的序参数随径向位置的变化

为说明球腔内圆柱颗粒取向的有序性，我们借鉴液晶系统，定义了方向序参数 $\lambda = 1/2 \cdot (3 \cos^2 \theta - 1)$ ，其中 $\cos \theta = \mathbf{m} \cdot \mathbf{n} / (|\mathbf{m}| |\mathbf{n}|)$ ， \mathbf{m} 是平行于圆柱中心线的向量， \mathbf{n} 是从球腔中心指向圆柱质心的向量。当 $\lambda=0$ 时，圆柱颗粒的取向为无序（各向同性的状态）。图 8 展示了不同浓度下圆柱颗粒的方向序参数随径向位置的变化。我们发现，在最靠近壁面处，圆柱颗粒有序排列，其中心线与壁面切向平行。在远离壁面处，当颗粒的体积分数为 5% 时，圆柱颗粒的取向为无序；当颗粒的体积分数为 10% 时，在 $4 < r < 11$ 区间内大部分圆柱颗粒为有序状态；当颗粒的体积分数为 15% 时，在 $2 < r < 11$ 区间内大部分圆柱颗粒为有序状态。该结果表明，颗粒浓度越高，圆柱颗粒呈现出有序性的区域越广。

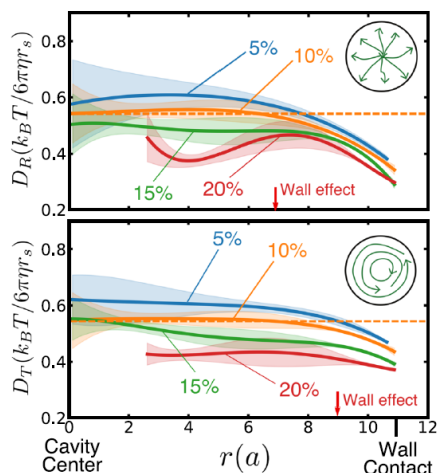


图9 球腔内微流体中不同浓度圆球颗粒的短时扩散系数随径向位置的变化

图9展示了圆球颗粒的径向和切向短时扩散系数。当颗粒的体积分数为5%时，球腔中心处的短时扩散系数约为无界情况的60%。随着颗粒体积分数的增加，短时扩散系数减小。壁面对颗粒径向扩散的影响大于切向扩散的影响：对体积分数为10%的情况，径向扩散系数在 $r > 7$ 时随径向位置的增加而显著减小，而切向扩散系数在 $r > 8$ 时显著减小；从 $r=7$ 到 $r=11$ ，径向扩散系数减小了约0.2，而从 $r=8$ 到 $r=11$ ，切向扩散系数减小了约0.12。当体积分数为20%时，径向短时扩散系数存在一个极小值和极大值，这与颗粒的层状聚集结构有关。

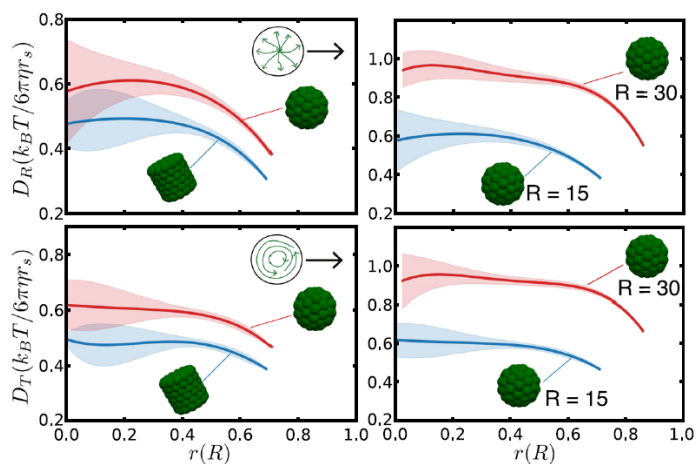


图10 球腔内微流体中圆球与圆柱颗粒短时扩散系数的对比

颗粒形状对其短时扩散系数也有一定的影响，图10比较了圆球和圆柱颗粒的短时扩散系数。研究表明，在等体积的情况下，圆柱颗粒的短时扩散系数更小，这主要由于圆柱颗粒破坏了空间对称性。对于圆球与圆柱颗粒，短时扩散系数随颗粒径向位置的变化规律定性相同。随着颗粒与球腔的体积比减小，球腔内颗粒的短时扩散系数更接近于颗粒在无界流体中的短时扩散系数。

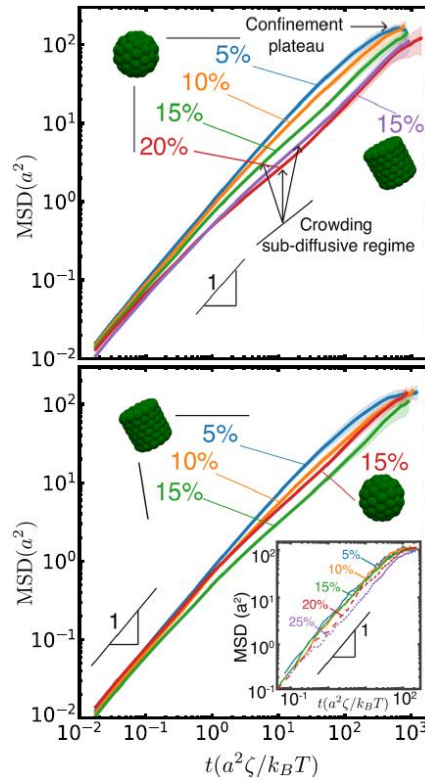


图11 球腔内微流体中颗粒做布朗运动时均方位移随时间的变化

最后，我们研究了不同浓度下颗粒的长时扩散，即颗粒的均方位移随时间的变化。在无界流体中，均方位移随时间线性增长，而在球腔内微流体中，由于壁面的限域作用，均方位移在一定时间后会达到稳定值，不会无限增长。图 11 中的结果表明，对于圆球颗粒，当颗粒的体积分数升高至 15%和 20%时，在初始的正常扩散之后，会出现亚扩散现象。插图展示了点颗粒的均方位移随时间的变化情况，在体积分数较高的情况下，点颗粒并没有出现亚扩散现象。由于点颗粒模拟中只考虑了长程水动力学相互作用和排斥力，因此圆球和圆柱颗粒的亚扩散现象源于颗粒间的短程水动力学相互作用。另外，颗粒形状对长时扩散有一定的影响，圆球颗粒在体积分数为 15%时会出现亚扩散现象，而圆柱颗粒在体积分数为 10%时就出现了亚扩散现象。

三、结论

本文系统地阐述了一种高效模拟微流体中颗粒动力学的方法。针对微流体中颗粒运动的算例，将此方法的数值模拟结果与实验数据和解析解相对比，均获得了良好的吻合。本文所构造的方法计算效率和并行效率良好，具有大规模模拟含颗粒微流动的能力。我们针对多种不同的微流系统，使用该平台模拟了不同形状和大小颗粒的输运现象，揭示了颗粒的运动规律及其中的物理机制。

参 考 文 献

- 1 Happel J, Brenner H, Low Reynolds number hydrodynamics, The Hague, The Netherlands: Martinus Nijhoff Publishers, 1983: 1~19
- 2 Frenkel D, Smit B, Understanding molecular simulation: from algorithms to applications, Bodmin, Cornwall, Great Britain: MPG Books Ltd, 2001: 292~304
- 3 Zhao X, Li J, Jiang X, Karpeev D, Heinonen O, Smith B, Hernandez-Ortiz J, de Pablo J, Parallel O(N) Stokes' solver towards scalable Brownian dynamics of hydrodynamically interacting objects in general geometries, The Journal of Chemical Physics, 2017; 146: 244114
- 4 Fixman M, Simulation of polymer dynamics. I. General theory, The Journal of Chemical Physics, 1978; 69: 1527
- 5 Li J, Jiang X, Singh A, Heinonen O G, Hernández-Ortiz J P, de Pablo J J, Structure and dynamics of hydrodynamically interacting finite-size Brownian particles in a spherical cavity: Spheres and cylinders, The Journal of Chemical Physics, 2020; 152 (20): 204109
- 6 Singh A, Li J, Jiang X, Hernández-Ortiz J P, Jaeger H M, de Pablo J J, Shape induced segregation and anomalous particle transport under spherical confinement, Physics of Fluids, 2020; 32 (5): 053307