

## \* 学术论文 \*

## 分子动力学与连续介质力学耦合模型的研究及应用\*

李玉秀<sup>1,2</sup> 徐进良<sup>1\*\*</sup>

1. 中国科学院广州能源研究所, 广州 510640; 2. 中国科学院研究生院, 北京 100084

**摘要** 针对两无限大平行平板作相对运动形成的 Couette 流, 采用分子动力学(MD)与连续介质力学(C)的耦合模型揭示了尺度变化对固液界面边界条件的影响. 该模型将整个计算域划分成三个子区域, 即 MD(P)区、C区和MD与C间的重叠区. 在重叠区内进行由两类计算方法所获得结果的“信息交换”. 通过在纳米尺度下将耦合模型与纯 MD 计算结果的比较, 验证了耦合模型的正确性. 研究表明, 在表观剪切率、固液界面相互作用参数给定条件下, 固液界面滑移速度并不随尺度增大而改变, 并因此导致实际剪切率更加接近于表观剪切率.

**关键词** 分子动力学 耦合模型 界面边界条件 剪切率

近年来, 微电子机械系统发展迅速, 在这样的微系统中, 其通道的水力直径在  $1\ \mu\text{m}$  到  $1\ \text{mm}$  之间. 由于微通道具有极大的表面积/体积比值, 出现了许多微尺度效应, 最典型的有: 电双层效应<sup>[1]</sup>, 分子力效应<sup>[2]</sup>, 表面张力效应<sup>[3]</sup>等. 微流体重要问题之一是界面边界条件的确定, 在大尺度下的无滑移边界条件, 在微尺度下则受到挑战.

液体在微通道内的流动与传热问题非常复杂. 在实验方面, 当通道水力直径下降到微米或亚微米级时, 测量变得异常困难. 液体分子排列紧密, 它们始终处于碰撞状态. 当外界施加剪切力时, 液体中就会产生速度梯度. 整体上来说, 分子间力的总和必须与外界施加的剪切力相平衡<sup>[4]</sup>.

MD方法由于能够在真正微观条件下进行传热传质分析, 在数学上是十分严密的. 随着计算工具的不断发展, MD方法被广泛地应用于微流体的研究. 然而, MD模拟的尺度一般仅限于纳米水平, 其计算结

果不能直接应用于微米尺度的微流体器件.

分子动力学与连续介质力学耦合模型的概念最早由 Connell 和 Thompson<sup>[5]</sup>在 1995 年提出. 该文描述了在分子动力学与连续介质力学两类计算区域界面上应遵守的约束条件. 文献[6]提出了分子动力学与连续介质力学耦合模型的区域分解方法, 该方法适合于复杂的二维通道. 文献[7]主要研究由分子动力学的计算结果估算宏观热力学参数, 以便使耦合界面上的粒子质量、动能及能量的波动最小. 文献[8]针对通道中的非稳定流动给出了分子动力学计算区(MD区)、连续介质力学区(C区)及耦合区三区间的质量、动量及能量交换的方法. Barsky<sup>[9]</sup>则将耦合模型的计算结果与纯 MD 计算结果进行了比较.

总之, 由于微流体技术的快速发展, 耦合模型的研究在近年来得到了关注. 研究的重点集中在如何在耦合区域内保持质量、动量及能量的连续可导及耦合模型的通用性. 耦合模型的研究是国际上在

2005-04-28 收稿, 2005-08-04 收修改稿

\* 国家自然科学基金资助项目(批准号 10272102)

\*\* 通讯作者, E-mail: xujl@ms.giec.ac.cn

微流体研究方面新的增长点<sup>[9]</sup>, 它大大拓宽了分子动力学的适用范围, 具有很强的科学意义, 所得计算结果可以直接为微流体 MEMS 器件的设计、制造和运行提供科学依据和指导。

本文以研究 Couette 流的固液界面边界条件为应用背景, 重点抓住界面现象的物理本质, 即固液界面分子间相互作用是短程力作用, 其有效作用尺度小于  $3\sigma$ . 将整个计算区域划分为 MD(P)区、C区及耦合区. 在 MD 区进行分子动力学计算, 在 C 区进行连续介质力学计算, 而在耦合区既进行分子动力学计算, 又进行连续介质力学计算. 耦合区的上下界面就构成了分子动力学与连续介质力学两类计算的信息交换场所, 以保证诸参数在两类计算区域的连续可导性. 采用耦合模型, 主要研究了固液分子作用参数对边界条件的影响及边界条件随尺度的变化关系。

### 1 问题描述

所研究的 Couette 流如图 1 所示, 由上下两固体壁面及其间的 Lennard-Jones(LJ)液体组成, 上下壁面分别以  $u_w$  和  $-u_w$  在  $x$  方向上作相对运动. 坐标原点选取在下壁左上顶点位置. 由于所研究问题的对称性, 计算域仅考虑中心对称面以下的区域. 将整个计算域划分为 3 个子区域: MD(P)区 ( $0 < z < l_{cp}$ ), C区 ( $l_{pc} < z < l_z$ ) 和耦合区 ( $l_{pc} < z <$

$l_{cp}$ ). 对于本文所研究的问题, 在  $x$  和  $y$  两个方向上存在周期性边界条件,  $z$  方向则不存在周期性边界条件. 如图 1 所示, 存在两个薄层, 即  $\Delta z_{cp}$  和  $\Delta z_{pc}$ .  $z=l_{cp}$  为薄层  $\Delta z_{cp}$  上界面位置,  $z=l_{pc}$  为薄层  $\Delta z_{pc}$  的中心平面位置. 取  $\Delta z_{cp}=2.5\sigma$ ,  $\Delta z_{pc}$  等于 MD 统计时划分的一个液体层(bin)的厚度. 在  $x$  和  $y$  方向,  $l_x=l_y=6.8\sigma$ , 研究表明, 进一步增大  $l_x$  和  $l_y$  对计算结果无影响。

对于宏观尺度下的 Couette 流, 其间流体速度分布以  $+u_w$  和  $-u_w$  为最大和最小速度呈线性分布. 然而, 在微尺度下, 由于固液界面附近复杂的分子间力的相互作用, 而呈现三类不同的界面边界条件, 即滑移、无滑移和锁定(locking)边界条件<sup>[10]</sup>. 另一方面, 由于分子间力的相互作用是短程力作用, MD 计算的截断长度可取为  $2.5\sigma$ . 在本文中, 选取  $l_{cp}=17.85\sigma$ ,  $l_{pc}=7.79\sigma$ . 而  $l_z$  可以按照不同的尺度在宽广的范围内变化, 以研究不同尺度对微流体界面边界条件的影响。

由于液体在  $z$  方向上的速度梯度是通过上下两固壁的相对运动产生的, 定义表观剪切率,  $\eta=2u_w/2l_z=u_w/l_z$ . 因而本问题的控制参数为  $\eta$ ,  $l_z$  和固液分子作用参数. 一旦给定  $\eta$ , 固壁运动速度可确定为  $u_w=\eta \cdot l_z$ .

#### 1.1 固液界面耦合参数及其对边界条件的影响

本文研究 Lennard-Jones 液体(液氩), 原子质量  $m=66.3 \times 10^{-27} \text{ kg}$ , 特征长度尺度  $\sigma=0.3406 \text{ nm}$ , 无量纲密度  $\rho\sigma^3=0.805$ , 特征能量尺度  $\epsilon=1.653 \times 10^{-21} \text{ J}$ , 特征时间尺度  $\tau=\sigma\sqrt{m/\epsilon}=2.16 \times 10^{-21} \text{ s}$ . 由于自然界物质的复杂性, 原子可以呈现不同的晶向排列, 如半导体硅, 可以呈现  $\langle 100 \rangle$  和  $\langle 101 \rangle$  等不同的晶向排列. 本文选取面心立方结构(fcc). 其固体原子密度为  $\rho$ , 一对固液原子相互作用的能量尺度为  $\epsilon_{wf}$ , 长度尺度为  $\sigma_{wf}$ . 定义三个无量纲参数:  $c_1=\rho_w/\rho$ ,  $c_2=\epsilon_{wf}/\epsilon$ ,  $c_3=\sigma_{wf}/\sigma$ .  $c_1$ ,  $c_2$  和  $c_3$  称为固液原子相互作用参数。

一对固液原子的相互作用的势能可表示为

$$\phi_{1-s} = 4c_2\epsilon \left[ c_3^{12} \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - c_3^6 \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

考虑固液界面上两相邻固体原子 A 和 B. 建立一维坐标系, 如图 2 所示, 固体原子 A 和 B 的无量纲坐

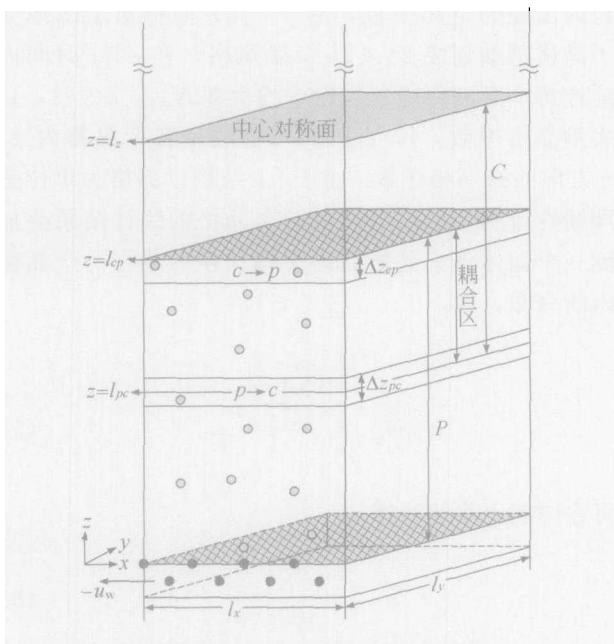


图 1 耦合模型几何结构及区域划分

标分别为  $-0.85c_1^{-1/3}$  和  $0.85c_1^{-1/3}$ . 当液体原子  $C$  沿直线  $AB$  运动时, 所形成的无量纲势能和力如图 2 所示 ( $c_1=1.0, c_2=1.0$ ). 对于任意  $c_1, c_2$  和  $c_3$  参数组合, 三个原子间的势能曲线必有两个最小值点, 对应于  $F_{A-C}+F_{B-C}=0$ . 对  $\phi_{A-C}+\phi_{B-C}$  对  $x$  求导并令其为零, 可得两最小值点间的距离  $L_U$  为

$$L_U = 2(0.85c_1^{-1/3} - 2^{1/6}c_3), \quad (2)$$

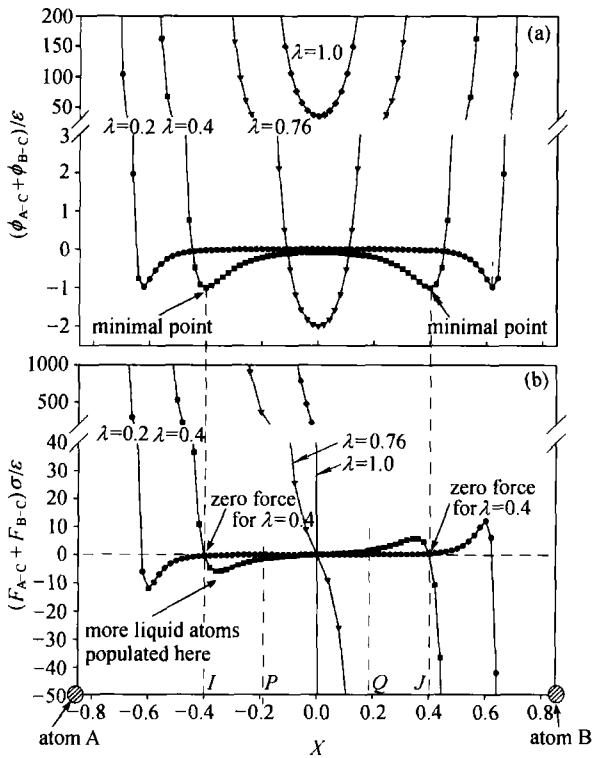


图 2 液体分子与两相邻固体分子形成的势能与力分布 ( $c_1=1.0, c_2=1.0$ )  
(a) 势能分布; (b) 力分布

因而  $L_U$  相对于两固体原子间的相对长度为

$$\varphi = \frac{L_U}{L_{AB}} = \frac{2(0.85c_1^{-1/3} - 2^{1/6}c_3)}{1.7c_1^{-1/3}} = 1 - 1.32c_1^{1/3}c_3, \quad (3)$$

定义  $\lambda=c_1^{1/3}c_3$ , (3) 式变为

$$\varphi = 1 - 1.32\lambda. \quad (4)$$

当  $\lambda=0.757$  时, 两个势能最小值点重合在  $x=0$

处, 成为一个最小值点, 液体分子被限制在非常狭小的范围内, 使得液体分子在平行于  $xy$  平面方向呈 fcc 结构排列, 看起来就像是固体 fcc 结构在液体区内的延伸, 称之为外延附生 (epitaxial order). 同样由于这种限制作用使得液体分子的运动与固体分子几乎达到同步, 统计平均后的近壁液体层的宏观速度基本与板速一致, 表现为锁定或无滑移边界条件. 当  $\lambda$  偏离 0.757 时, 两势能最小值点距离增大, 液体分子在固体分子的晶面上的活动范围较大, 形成液体分子在平行于  $xy$  平面方向上的无序排列, 这时液体分子的运动不再与固体分子同步, 统计平均后的近壁液体层的宏观速度小于板速, 表现为滑移边界条件. 由以上可见,  $\lambda$  是控制固液界面边界条件的关键参数.

### 1.2 固液界面边界条件的定义及分子概率密度分布 (PR 分布)

根据两板间速度分布曲线在  $z=l_z$  处的切线在速度轴上的不同截距  $u_s$  与板速  $u_w$  之差  $u_{sp}$  ( $u_{sp} = u_w - u_s$ ), 将边界条件划分为滑移、无滑移和锁定, 分别对应  $u_{sp} > 0, u_{sp} = 0$  和  $u_{sp} < 0$ .

引入分子空间概率分布 (简称 PR 分布) 的概念, 其物理意义是在时间和空间平均下分子在晶格内空间各点出现的概率. 在  $l_x l_y$  面积内存在四个固体分子晶格, 为了统计液体分子在一个固体分子晶格面积内出现的空间位置, 沿  $x, y$  方向将每个固体分子晶格再细划成  $24 \times 24$  个微网格, 在  $100\tau$  时间内统计每个微网格内落入粒子的次数  $N_{i,j}^k, k \in (1, 4)$  表示晶格序号,  $i, j \in (1, 24)$  表示各个晶格内  $x, y$  方向的微网格序号. 由于 fcc 结构以晶格为单位呈周期性排列, 所以可以将四个晶格的统计结果叠加到一个固体分子晶格后再平均, 相当于在一个晶格内的分布, 即

$$\bar{N}_{i,j} = \frac{\sum_{k=1}^4 N_{i,j}^k}{4}, \quad (5)$$

再在时间上平均, 即

$$\bar{\bar{N}}_{i,j} = \frac{\bar{N}_{i,j}}{100\tau/\delta\tau}. \quad (6)$$

$\delta t = 0.0001\tau$  是计算采用的时间步长.  $\overline{N}_{i,j}$  就是时空统计下的 PR 分布. 用这种方法统计得到的 PR 分布可以很好的显示粒子的分布规律, 对于揭示界面边界条件的形成机理具有重要意义.

## 2 耦合模型

上节我们对考虑固液分子间力相互作用的微 Couette 流进行了描述, 并介绍了固液相互作用参数对微流动边界条件的影响, 边界条件的定义及表征等. 本节我们着重论述耦合模型的原理. 由于耦合模型涉及到三个子区域的计算, 以下分别论述.

### 2.1 MD(P)区计算

MD 计算应用牛顿第二定律, 固壁分子在计算过程中始终保持 fcc 结构, 但上下壁面沿  $x$  方向作相对运动. 液体分子在初始时刻采用 fcc 结构, 但随着计算时间的推进, 将不再遵守 fcc 结构. 第一层液体分子位于下壁面上方  $0.85\sigma$  处. 采用 Gear 方法计算单个分子在任意时刻与其他分子的相互作用力(加速度)、位移和速度<sup>[2]</sup>. 液体分子  $i$  不仅受其他液体分子产生的相互作用, 同时还受到下壁面分子的作用力. 任意分子运动的方程可写为

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \sum_{j \neq i, j=1}^N \mathbf{F}_{ij} + \sum_{j_w=1}^{N_w} \mathbf{F}_{ij_w}, \quad (7)$$

公式(7)右边第一项表示液体分子间作用力, 第二项表示固液分子间作用力. 一对分子间作用力可写为

$$\mathbf{F}_{ij} = -\frac{\partial \phi_{ij}}{\partial \mathbf{r}_{ij}}, \quad (8)$$

公式(8)中的 Lennard-Jones 势能可写为

$$\phi(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (9)$$

分子间相互作用力在  $2.5\sigma$  处截断.

在初始时刻, 液体分子按 fcc 结构排列, 液体分子的初始速度如能满足

$$\frac{3}{2} N k_B T_t = \frac{1}{2} m \sum_{i=1}^N (u_{i,x}^2 + u_{i,y}^2 + u_{i,z}^2), \quad (10)$$

则能加快收敛速度. 液体分子的初始加速度根据分子所在位置按牛顿第二定律计算, 其他各高阶导数项在初始时刻赋值为零.

为了统计宏观速度与密度分布, 将计算区域在  $z$  方向上划分成平行于  $xy$  平面的若干液体层, 在时间和空间上统计平均各层的粒子速度和数量, 得到宏观速度场和密度场.

在 MD 和 C 的耦合模型中, 应保证 MD 区和 C 区流体具有相同的热力学状态. 在本文模型中, 上下两固体壁面匀速向  $+x$  和  $-x$  方向运动, 而不考虑分子的随机运动, 因此, 上下壁面温度假设为 0K. 随着 MD 计算时间的推进, 黏性耗散热逐渐加热液体分子, 使液体体系的温度升高. 在液体分子  $y$  方向上的动量方程中引入阻尼项和噪音项可以消除 MD 区液体温度的升高, 阻尼项和噪音项的计算见文献[11].

C 区液体无量纲密度取为  $\rho\sigma^3 = 0.805$ , MD 区液体密度初始值也取为  $\rho\sigma^3 = 0.805$ , 但随着计算的进行, 近壁区液体密度会出现波动. 这主要是由于近壁区复杂的固液分子相互作用引起的.

### 2.2 C区及耦合区计算

对于液体在微通道内流动的情形, 认为仍然满足连续介质力学假设, 其粒子密度  $\rho(\mathbf{R}, t)$ , 能量流密度  $\rho e(\mathbf{R}, t)$  及动量流密度  $\mathbf{j}(\mathbf{R}, t)$ , 满足 Navier-Stokes 方程<sup>[8]</sup>:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = -\nabla \cdot \rho \mathbf{u}, \quad (11)$$

$$\frac{\partial \mathbf{j}}{\partial t} = -\nabla \cdot (\mathbf{j} \mathbf{u} + \mathbf{\Pi}), \quad (12)$$

$$\frac{\partial \rho e}{\partial t} = -\nabla \cdot (\rho e \mathbf{u} + \mathbf{\Pi} \cdot \mathbf{u} + \mathbf{q}), \quad (13)$$

其中比内能  $e = u^2/2 + 3T/2 + \phi$ , 包含动能, 热能及势能  $\phi$ . 动量流包含对流项  $\mathbf{j} \mathbf{u}$  及压力张量  $\mathbf{\Pi} = \mathbf{P} \mathbf{I} + \bar{\tau}$ , 而压力张量包含静压项  $\mathbf{P}(\mathbf{R}, t)$  及切应力张量  $\bar{\tau}$ . 对于 LJ 流体, 满足守恒形式的切应力张量可以表示为

$$\bar{\tau} = -\mu \left( \nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T - \frac{2}{3} \nabla \cdot \mathbf{u} \right) - \xi \nabla \cdot \mathbf{u}. \quad (14)$$

能量流包含对流项  $\rho \mathbf{u} \mathbf{u}$ , 耗散能  $\boldsymbol{\Pi} \cdot \mathbf{u}$  及导热项, 导热项可以通过 Fourier 定律表述为  $\mathbf{q} = -k_c \nabla T(\mathbf{R}, t)$ . 为了封闭以上方程, 有必要知道其内能  $e(\rho, T)$ , 热力学状态方程  $P(\rho, T)$ .

以上讨论的是具有普适意义的耦合模型. 本文研究的微 Couette 流是具有普适意义耦合模型的一个特例, 主要采用如下介绍的简化方法来交换  $P$  区和  $C$  区的热力学和动力学参量信息, 而没有涉及到对压力项的处理. 由于问题的对称性, 两板中心平面处的  $x$  方向速度应为 0, 即  $u|_{z=l_z} = 0$ , 如果知道  $p \rightarrow c$  薄层中心平面处的速度  $u_{p \rightarrow c}$ , 那么  $C$  区内的速度分布可以写成

$$u = -\frac{u_{p \rightarrow c}}{l_z - l_p}(z - l_z), \quad (15)$$

另一方面, 一旦获得方程(15), 则  $c \rightarrow p$  薄层上界面所受来自  $z > l_{cp}$  区域的切应力应为

$$\tau = \mu \frac{\partial u}{\partial z} = -\mu \frac{u_{p \rightarrow c}}{l_z - l_p}, \quad (16)$$

在该界面的总的外力应为

$$F_{\text{ext}} = \tau \cdot l_x \cdot l_y = -\mu \frac{u_{p \rightarrow c}}{l_z - l_p} \cdot l_x \cdot l_y, \quad (17)$$

假设该外力均匀地分布在薄层  $\Delta z_{cp}$  的  $n_{cp}$  个粒子上, 就能写出该薄层内每个粒子的受力方程为

$$m_i \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \sum_{j \neq i, j=1}^N \mathbf{F}_{i,j} + \mathbf{F}_{\text{ext}}/n_{cp}. \quad (18)$$

注意到方程(18)右边第 1 项为薄层  $c \rightarrow p$  内粒子与  $z \leq l_{cp}$  区域的所有液体分子间的作用力, 第 2 项则表示  $z > l_{cp}$  区域的液体分子对  $i$  粒子相互作用的宏观表现. 对本文所研究的微 Couette 流, 耦合模型体现在: 在薄层  $p \rightarrow c$  内, 通过 MD 计算, 统计平均获得  $u_{p \rightarrow c}$ , 也就是获得了  $C$  区计算的下边界条件. 另一方面, 有了  $u_{p \rightarrow c}$ , 也就获得了(18)式中的  $F_{\text{ext}}$ , 即  $MD(P)$  区计算的上边界条件.

### 2.3 耦合模型迭代过程

迭代过程如图 3 所示, 总物理积分时间为  $300\tau$ , 统计一次速度和密度的时间跨度为  $100\tau$ . 图 3 分为两个体系, 第一个体系是带有箭头的虚线所描述的 MD 计算随时间的推进过程, 第二个体系中五个矩形框表示的是根据 MD 计算的数据在时间跨度为  $100\tau$  的时间段内进行统计平均的过程, 两个体系间交替着  $C$  与  $P$  间的信息交换.

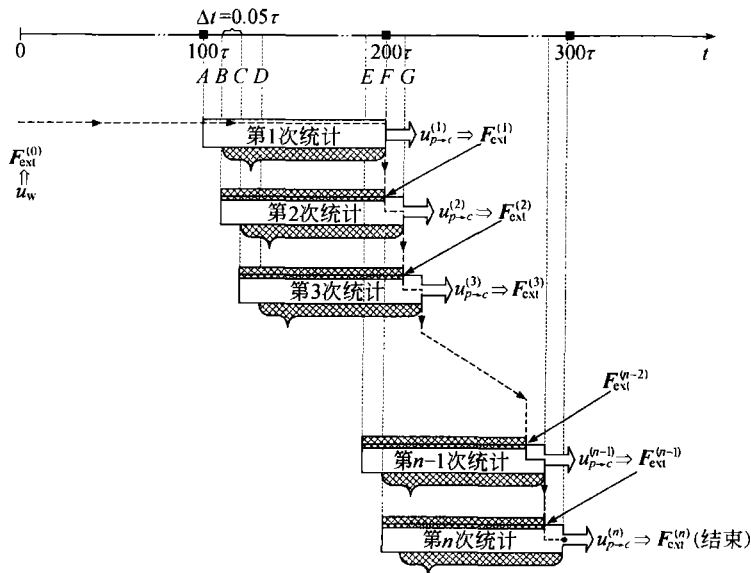


图 3 耦合模型的迭代过程

在  $t=0$  时刻给定初始条件: 假设从下壁面到中心面的速度场都呈线性分布, 则  $c \rightarrow p$  区的粒子受到的外力公式由

$$F_{\text{ext}}^{(0)} = -\mu \cdot \frac{u_w}{l_z} \cdot l_x \cdot l_y, \quad (19)$$

给出, 开始进行 MD 计算, 此初始条件一直沿用到  $t=200\tau$ ,  $t$  在  $(0-100)\tau$  的计算结果不计入统计. 计算到  $t=200\tau$  时, 统计平均  $t$  在  $(100-200)\tau$  计算结果, 即图 3 中的 AF 段对应的时间积分, 得到第一次统计平均的  $u_{p \rightarrow c}^{(1)}$ , 由公式(17)求得  $F_{\text{ext}}^{(1)}$ , 用  $F_{\text{ext}}^{(1)}$  代替  $F_{\text{ext}}^{(0)}$  作为 P 区的上边界条件, 从  $t=200\tau$  (F 点) 继续 MD 计算, 准备第二次统计平均 (BG 对应的时间段). 为了充分交换 C, P 信息、节省计算时间, 用  $F_{\text{ext}}^{(1)}$  作为边界条件的计算只向前推进了  $\Delta t=0.05\tau$  (即图中的 FG 段), 统计速度所需的其余的  $(100-0.05)\tau$  的数据继承自  $t$  为  $(100+0.05)\tau-200\tau$  时间段 (BF 段) 的计算结果, 图中打阴影的大括号框和矩形框表示了这一数据的继承过程. 由第二次统计得到  $u_{p \rightarrow c}^{(2)}$  推得  $F_{\text{ext}}^{(2)}$ , 再用  $F_{\text{ext}}^{(2)}$  替代  $F_{\text{ext}}^{(1)}$  作为 P 区的上边界条件, 继续下面  $\Delta t=0.05\tau$  时间段的 MD 计算, 如此类推, 直到计算结束, 得到最终的速度场和密度场分布.

### 3 结果与讨论

如 1.1 节所述,  $\lambda = c_1^{1/3} \cdot c_3$  越接近 0.76,  $c_2$  取值越大, 越接近锁定边界条件, 反之越接近滑移边界条件. 根据此规律本文的计算工况选定了  $\lambda = 0.3$ ,  $c_2 = 0.2$  和  $\lambda = 0.76$ ,  $c_2 = 4.0$  两组固液分子相互作用参数, 分别对应滑移和锁定两组边界条件. 对纯 MD 模型和耦合模型进行了计算分析, 采用相同的计算尺度 ( $l_z = 25.9\sigma$ ), 分别得到了各自的速度分布、密度分布和分子空间概率分布. 为了验证耦合模型的正确性, 以纯 MD 模型为参照对耦合模型进行了速度的误差分析, 而纯 MD 模型与文献[11]的结果进行了比较, 两者吻合很好.

#### 3.1 耦合模型与纯 MD 模型比较分析

图 4 (a) 横轴的取值范围是 0 到  $25.9\sigma$ , 纵轴表示的是除以下板速度后的无量纲速度. 图中描述的是 P 区域的速度和密度, 耦合模型中的 C 区的速度呈线性分布, 未在图中表示.

由图可见, 对于滑移和锁定的两个典型工况, 耦合模型与纯 MD 模型的速度分布吻合很好, 表 1 列出了以纯 MD 模型为参照的耦合模型速度场的均方根误差, 计算公式为

$$E = \sqrt{\sum_{i=1}^n \frac{\left( \frac{u_i^{(mdfit)} - u_i^{(cp)}}{u_i^{(mdfit)}} \right)^2}{n}}, \quad (20)$$

其中  $u_i^{(mdfit)}$  表示由 MD 计算结果拟合得到的速度值,  $u_i^{(cp)}$  表示直接由耦合模型计算得到的速度值, 由表 1 可见, 两种工况下的均方根误差均小于 3%. 表 2 是同工况下两者计算时间的比较, 耦合模型节省计算时间的优势随着尺度的增加得到体现. 在微米尺度下, 由于分子数大大增多, 纯 MD 计算不可能进行, 因而耦合模型大有用武之地.

表 1 耦合模型速度场误差分析

工况	滑移	非滑移	锁定
E/%	2.47	2.45	2.70

表 2 运行时间比较<sup>a)</sup>

工况	单位: h		
	滑移	锁定	非滑移
纯 MD ( $\Delta t = 0.0002\tau$ )	45	67	70
耦合 ( $\Delta t = 0.0001\tau$ )	19	37	20

a) 所用计算机为奔腾 4

两者的密度分布 (见图 4(b)) 在绝大部分区域也相当吻合, 只是在  $c \rightarrow p$  区的顶端出现了密度值下降的现象, 分析认为两个因素导致了这一结果: 一是直接将界面上的切应力平均分配给  $c \rightarrow p$  区内的每个粒子, 而实际上各粒子得到的剪切力大小应该乘以权重因子, 二是在处理分子与  $c \rightarrow p$  上界面发生碰撞时, 应用的是反弹模型, 碰撞后的粒子速度按 Maxwell 分布重新赋值, 按此速度计算在下一时间步长内粒子的坐标位置, 这是一种简化处理, 更为合理的处理方式是按照最低势能原则<sup>[12]</sup> 在计算域的适当位置重新插入粒子.

图 4(c)-(f) 表示两个模型在两种典型的固液相互作用参数下的 PR 分布, 由图可见, 耦合模型计算得到的 PR 分布与纯 MD 计算得到的 PR 分布吻合得很好, 对于滑移工况, 两者都是无序分布,

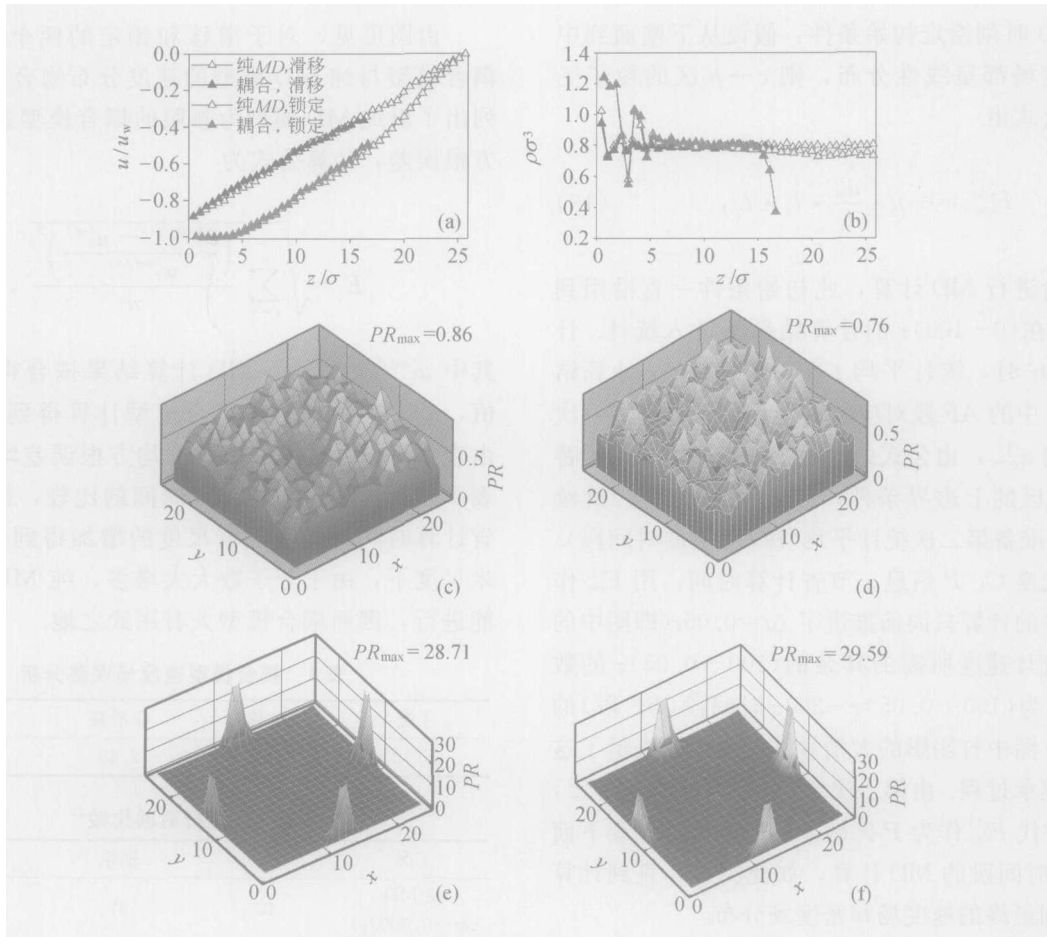


图4 滑移和锁定两种工况下的速度、密度和PR分布 ( $l_z = 25.9\sigma$ ), 滑移工况

( $c_1 = 1.0, c_2 = 0.2, c_3 = 0.3, \eta = 0.05$ ); 锁定工况 ( $c_1 = 1.0, c_2 = 4.0, c_3 = 0.76, \eta = 0.05$ )

(a) 速度分布比较; (b) 密度分布比较; (c) 滑移工况纯MD模型PR分布; (d) 滑移工况耦合模型PR分布;

(e) 锁定工况纯MD模型PR分布; (f) 锁定工况耦合模型PR分布

峰值分别是 0.86 和 0.76, 对于锁定工况, 两者都呈 fcc 排列, 峰值分别是 28.71 和 29.59, 这说明在耦合模型中, 将近壁区粒子的概率分布与界面边界条件建立对应关系, 可以很好地理解边界条件的物理本质.

### 3.2 微米尺度下的界面边界条件

研究微米尺度下固液界面边界条件, 选取的几何模型与前面介绍的基本一致, 只是大大增加了计算域的高度,  $l_z = 3000\sigma = 1.02\mu\text{m}$ . 固液相互作用参数选取三组:  $c_1 = 1.0, c_2 = 0.2, c_3 = 0.3$ ;  $c_1 = 1.0, c_2 = 1.0, c_3 = 0.7$ ;  $c_1 = 1.0, c_2 = 4.0, c_3 = 0.76$ . 图 5(a) 是三种典型工况下的速度场分布, 图 5(b)~(d) 是相应的 PR 分布.

由图 5(a) 的近壁区速度分布可见, 当  $c_1 = 1.0, c_2 = 0.2, c_3 = 0.3$  时, 速度场呈直线分布, 其下板

处的外延速度小于板速, 呈现滑移边界条件, 由与之对应的图 5(b) 的 PR 分布可见, 此时的近壁粒子呈无序排列. 当  $c_1 = 1.0, c_2 = 1.0, c_3 = 0.7$  时, 速度场也是线性分布, 下板处的外延速度近似等于板速, 呈现无滑移边界条件, 由图 5(c) 可见, 此时的近壁粒子开始呈现比较有规律的排列; 当  $c_1 = 1.0, c_2 = 4.0, c_3 = 0.76$  时, 速度场在两无限大平板中心平面处的切线在  $u$  轴上的截距大于板速, 此时的  $u_{sp}$  为负, 呈现锁定边界条件, 近壁粒子呈现非常规则的 fcc 结构排列, 即外延附生. 由以上可见, 在微米尺度下仍然存在由固液相互作用参数控制的三类边界条件, 由近壁粒子的微观排列可见, 其控制机理与纳米尺度下的相同, 都是由固液分子间的短程力控制的.

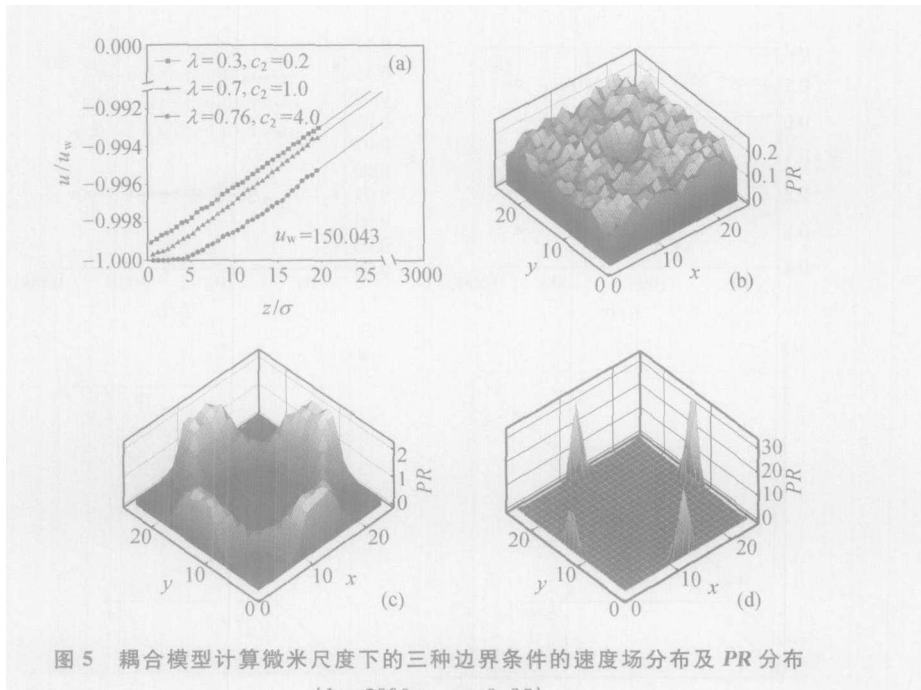


图5 耦合模型计算微米尺度下的三种边界条件的速度场分布及 PR 分布

( $l_z = 3000\sigma, \eta = 0.05$ )

(a) (b)  $\lambda=0.3, c_2=0.2$ ; (c)  $\lambda=0.7, c_2=1.0$ ; (d)  $\lambda=0.76, c_2=4.0$

### 3.3 界面边界条件随尺度的变化规律

长期以来, 无滑移边界条件被认为是理所当然的. 近年来, 由于微/纳米技术的快速发展, 无滑移边界条件受到挑战. 时至今日, 人们并不清楚物理意义上的“宏观”和“微观”尺度的界限在何处? “宏观”和“微观”尺度下的边界条件是具有不同的机理, 还是具有某种内在的统一?

本文在表观剪切率  $\eta = 0.05$ , 三组典型固液相互作用参数下, 在宽广的尺度范围内进行了计算. 图 6(a) 表示界面滑移速度  $u_{sp}$  随尺度的变化关系. 我们发现, 在固定的固液相互作用参数下,  $u_{sp}$  并不随尺度变化. 例如, 对于  $c_1=1.0, c_2=0.2, c_3=0.3$  (滑移工况),  $u_{sp} \approx 0.1$ ; 对于  $c_1=1.0, c_2=4.0, c_3=0.76$  (锁定工况),  $u_{sp} \approx -0.3$ ; 对于  $c_1=1.0, c_2=1.0, c_3=0.7$  (无滑移工况),  $u_{sp} \approx 0$ . 我们称之为滑移速度恒定规律.

只要  $u_{sp} \neq 0$ , 滑移速度恒定就会使实际剪切率  $\eta_r$  随尺度变化, 其变化趋势是随尺度增大越来越接近  $\eta$ , 图 6(b) 表示了这一规律. 滑移工况下的  $\eta_r$  随尺度的增大而逐渐增大, 到  $l_z=100\sigma$  时已非常接近  $\eta$ . 在锁定工况下,  $\eta_r$  开始时大于  $\eta$ , 随尺度的增大而逐渐减小, 到  $l_z=100\sigma$  时也开始接近  $\eta=0.05$ .

对于  $u_{sp} \approx 0$  的无滑移工况,  $\eta_r$  始终等于  $\eta$ .

图 6(c) 表示了滑移工况下  $u_{sp}$  恒定是如何影响  $\eta_r$  随尺度的变化的. 图中表示了相同的固液相互作用参数下、两种不同尺度下的速度分布. 为清晰起见, 两 Couette 流的中心平面重合, 过对角的斜线表示了对应于表观剪切率下的速度分布, 两种尺度下的表观剪切率相同. 标有 1 和 2 的直线分别表示小尺度和大尺度下的实际速度分布曲线, 两者具有相同的速度差  $u_{sp}$ ,  $\alpha_1$  和  $\alpha_2$  分别是两个尺度下的实际速度曲线与表观剪切率对应的速度曲线的夹角, 表示了实际剪切率与表观剪切率的接近程度. 由图可见,  $\alpha_2 < \alpha_1$ , 这表明, 较大尺度下的实际剪切率更加接近表观剪切率. 这就是固液界面滑移速度守恒对不同尺度下实际剪切率的影响, 对于锁定边界条件, 也存在类似的情况, 如图 6(d) 所示, 只不过是在小尺度下, 锁定工况下的实际剪切率要大于表观剪切率. 而对于无滑移工况, 由于  $u_{sp} \approx 0$ , 所以  $\eta_r$  始终等于  $\eta$ , 无滑移工况是从滑移到锁定中间的一个过渡. 这说明在大尺度下, 即无论  $u_{sp}$  取何值, 相对应的  $\eta_r$  都近似等于  $\eta$ .

由以上可见, 在任何尺度下, 固液界面滑移速度只受表观剪切率和固液相互作用参数所制约并保



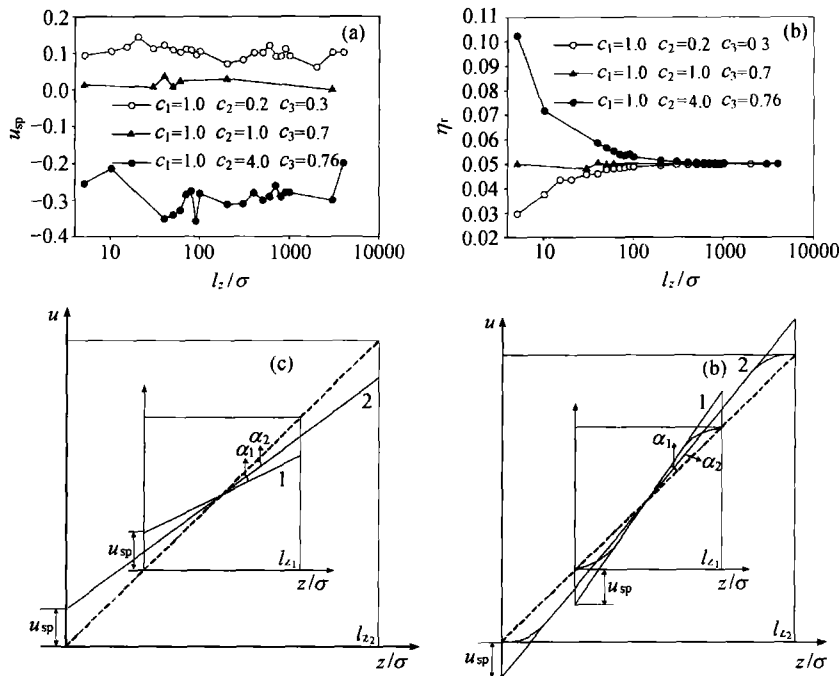


图6 实际剪切率随尺度变化的分布及原理图  
 (a) 三种典型工况下  $u_{sp}$  随尺度变化的分布; (b) 三种典型工况下  $\eta_r$  随尺度变化的分布;  
 (c) 滑移工况下  $u_{sp}$  恒定对  $\eta_r$  的影响; (d) 锁定工况下  $u_{sp}$  恒定对  $\eta_r$  的影响

持恒定. 固液分子从弱相互作用到强相互作用的过渡导致  $u_{sp}$  从大于 0 到小于 0 的过渡, 因而, 都存在滑移、无滑移和锁定三类边界条件.

在大尺度下, 根据表观剪切率和固液相互作用参数的不同, 仍然存在滑移、无滑移和锁定三类边界条件, 是物理本质. 而然, 由于这三类边界条件下的实际剪切率都无限趋近于表观剪切率, 表现出“拟”无滑移边界条件的特性, 是表象.

另外, 从边界条件的物理意义上来说, 并不存在“宏观”和“微观”的明显界限.

#### 4 结论

(1) 本文采用了分子动力学与连续介质力学的耦合模型, 通过在相同尺度下与纯分子动力学模型计算结果的比较, 验证了耦合模型的正确性, 通过计算时间的比较, 说明了耦合程序的高效性.

(2) 利用耦合模型计算了在微米尺度范围内的三种固液耦合参数下的速度分布、密度分布和 PR 分布, 发现在微米尺度下仍然存在由固液相互作用参数控制的三类边界条件, 其物理机理与纳米尺度

下的一致.

(3) 在任何尺度下, 固液界面滑移速度只受表观剪切率和固液相互作用参数所制约并保持恒定, 因此在任何尺度下都可以存在三类边界条件, 大尺度下的“无滑移边界条件”只是实际剪切率无限趋近于表观剪切率的表象.

(4) 本文所提耦合模型还需进一步改进, 以抑制粒子在  $c \rightarrow p$  区上界面处波动.

#### 符号表

$c_1$	固液分子作用参数, $c_1 = \rho_w / \rho$
$c_2$	固液分子作用参数, $c_2 = \epsilon_{wf} / \epsilon$
$c_3$	固液分子作用参数, $c_3 = \sigma_{wf} / \sigma$
$e / (\text{J} \cdot \text{kg}^{-1})$	比内能
$F_{ext} / N$	$c \rightarrow p$ 区全体粒子受到的 $z > l_{cp}$ 区粒子的剪切力
$F_{ij} / N$	液液分子间作用力
$F_{iw} / N$	固液分子间作用力
$j / (\text{kg} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{s}^{-1})$	动量流密度
$k_B / (\text{J} \cdot \text{K}^{-1})$	Boltzmann 常数
$k_c / (\text{W} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{K}^{-1})$	导热系数

$l_{cp}/m$	粒子区上界面 $z$ 方向坐标
$l_{pc}/m$	连续介质区下界面 $z$ 方向坐标
$l_x, l_y, l_z/m$	计算域 $x, y, z$ 方向长度
$m_i/kg$	液体分子质量
$N_{i,j}^s$	每个微网格内落入粒子的次数
$\bar{N}_{i,j}$	空间平均后的每个微网格内落入粒子的次数
$\bar{N}_{i,j}$	时空平均后的每个微网格内落入粒子的次数, 即 PR 分布
$N$	液体分子总数
$P/(N \cdot m^{-2})$	静压
$q/(W \cdot m^{-2})$	导热项
$r/m$	两个分子间距
$\mathbf{R}/m$	空间坐标矢量
$R_{out}/m$	分子间作用截断长度, $r > R_{cut}$ 时两分子间作用力为 0
$t/s$	时间
$T/K$	整体温度
$T_{fluid}/K$	液体温度
$\delta t/s$	时间步长
$\Delta t/s$	$0.05\tau$ 时间段
$\Delta \bar{t}/s$	$100\tau$ 时间段
$u/(m \cdot s^{-1})$	宏观速度
$u_i^{(cp)}$	无量纲, 耦合模型模拟得到的速度值
$u_i^{(md fit)}$	无量纲, 由 MD 计算结果拟合后得到的速度值
$u_{i,pc}$	无量纲, $x=l_{pc}$ 处 $x$ 方向宏观统计速度
$u_{i,z}$	无量纲, 中心对称面处 $x$ 方向宏观统计速度
$u_s$	无量纲, 两板中心平面处的速度切线在速度轴上的截距
$u_{sp}$	无量纲, 滑移速度
$u_w$	无量纲, 上下板速
$u_{i,x}, u_{i,y}, u_{i,z}/m \cdot s^{-1}$	粒子在 $x, y$ 和 $z$ 方向的微观速度
$\epsilon/J$	液液分子间能量尺度
$\epsilon_{wf}/J$	固液分子间能量尺度
$\phi/J$	势能
$\tau/s$	Lennard-Jones 分子的特征时间
$\bar{\tau}/(N \cdot m^{-2})$	切应力张量
$\mu/(kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	动力黏度
$\xi/(kg \cdot m^{-1} \cdot s^{-1})$	体积黏度
$\lambda$	无量纲参数, $\lambda = c_1^{1/3} c_3$
$\varphi$	无量纲参数, 液体原子与两相邻固体原子间势能最小值点的距离与两固体原子

	间距离的比值
$\rho/m^{-3}$	液体分子密度
$\rho_w/m^{-3}$	固体分子密度
$\sigma/m$	液液分子间的长度尺度
$\sigma_{wf}/m$	固液分子间的长度尺度
$\Pi/N \cdot m^{-2}$	压力张量
$\eta$	表观剪切率
$\eta_r$	实际剪切率

### 参 考 文 献

- Zhao T S, Liao Q. Thermal effects on electro-osmotic pumping of liquids in microchannels. *J of Micromech Microeng*, 2002, 12: 962—970
- Xu J L, Zhou Z Q, Xu X D. Molecular dynamics simulation of micro poiseuille flow for liquid argon in nanoscale. *Int J of Numerical Methods for Heat and Fluid Flow*, 2005, 15: 664—688
- 甘云华, 徐进良, 周继军, 等. 微尺度相变传热的关键问题. *力学进展*, 2004, 34(3): 399—407
- Rostami A A, Mujumdar A S, Saniei N. Flow and heat transfer for gas flowing in microchannels; A review. *Heat and Mass Transfer*, 2002, 38: 359—367
- Connell S T, Thompson P A. Molecular dynamics-continuum hybrid computations; A tool for studying complex fluid flow. *Phys Rev E*, 1995, 52: 5792—5795
- Hadjiconstantinou N G, Patera A T. Heterogeneous atomistic-continuum representations for dense fluid systems. *Int J of Modern Physics C*, 1997, 8: 967—976
- Li J, Liao D Y, Yip S. Nearly exact solution for coupled continuum/MD fluid simulation. *J of Computer-Aided Materials Design*, 1999, 6: 95—102
- Delgado B R, Coveney P V. Continuum-particle hybrid coupling for mass, momentum, and energy transfers in unsteady fluid flow. *Phys Rev E*, 2003, 67: 046704—1—13
- Barsky S, Delgado B R, Coveney P V. Comparison of molecular dynamics with hybrid continuum-molecular dynamics for a single tethered polymer in a solvent. *J of Chem Phys*, 2004, 121(5): 2403—2411
- Thompson P A, Robbins M O. Shear flow near solids: Epitaxial order and flow boundary conditions. *Phys Rev E*, 1990, 41: 6830—6837
- Thompson P A, Troian S M. A general boundary condition for liquid flow at solid surfaces. *Letters to Nature*, 1997, 389: 360—362
- Delgado B R, Coveney P V. Usher; an algorithm for particle insertion in dense fluids. *J of Chem Phys*, 2003, 119: 978—987