纳米尺度低速流动的速度计算
（分子动力学方法）

张文飞

燕山大学

纳米尺度流动的应用背景

特征尺寸: 在10^{-9}m到10^{-7}m(1nm-100nm)之间

微电机系统（MEMS），
材料工程，表面问题，
摩擦问题，润滑问题，
传热问题，生命科学，
医学领域…

主要方法：…

纳米尺度流动研究的现状

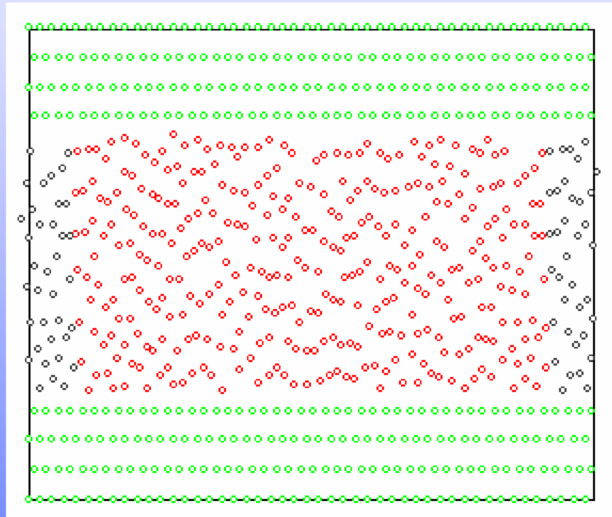
模型类型:

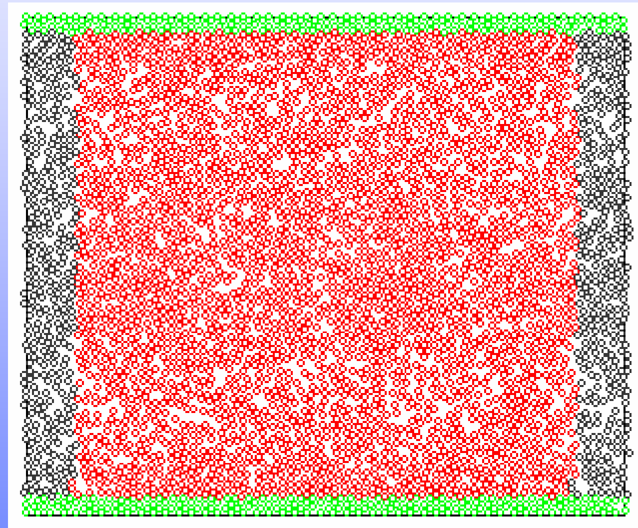
液体、气体、多相流、渗流...

参数计算:

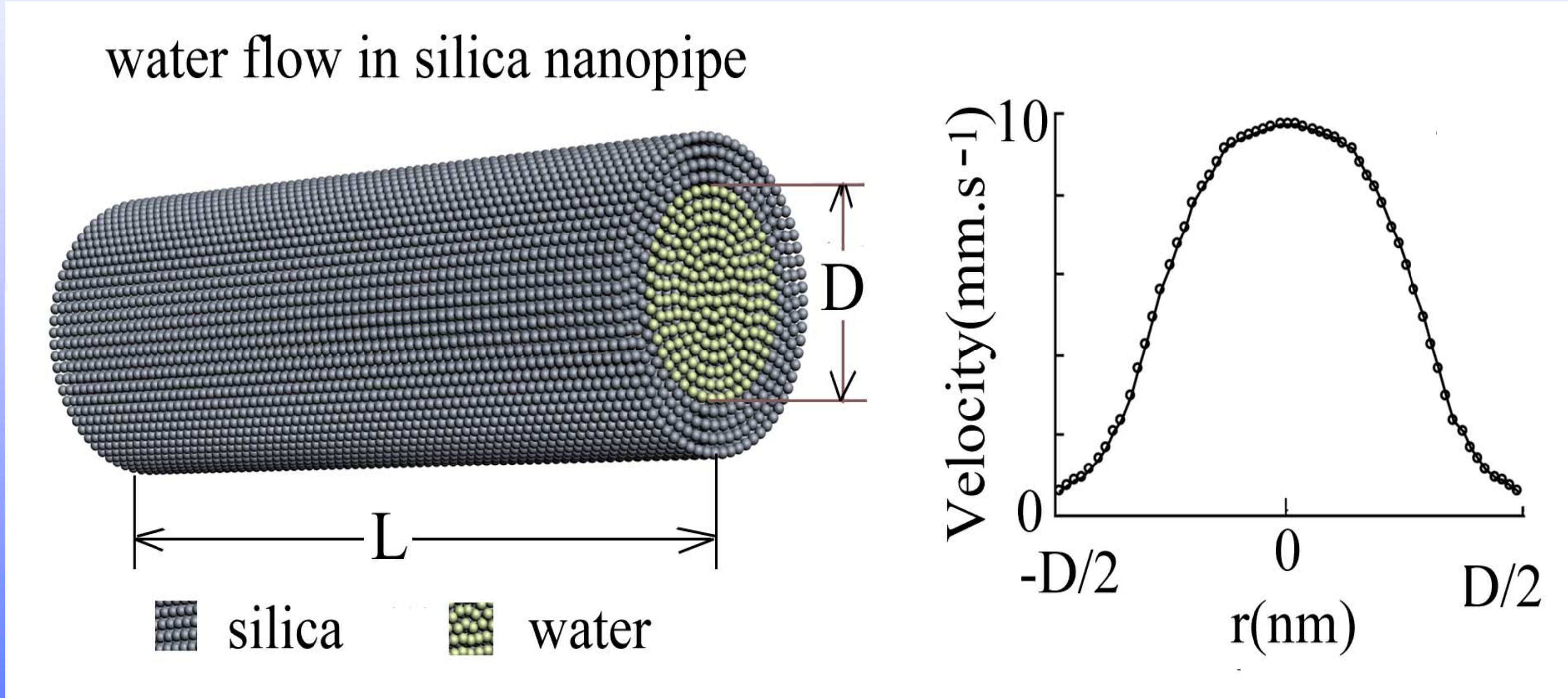
速度、压力、密度、导热系数、粘度、温度...

管内流动问题



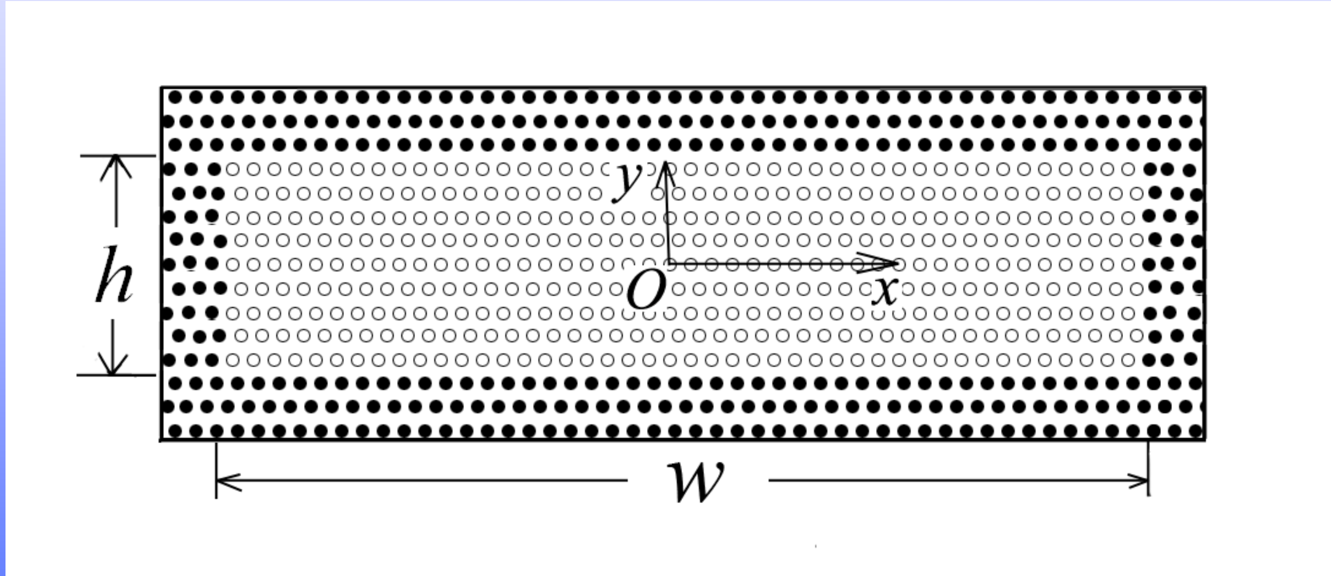


圆截面管内流动问题

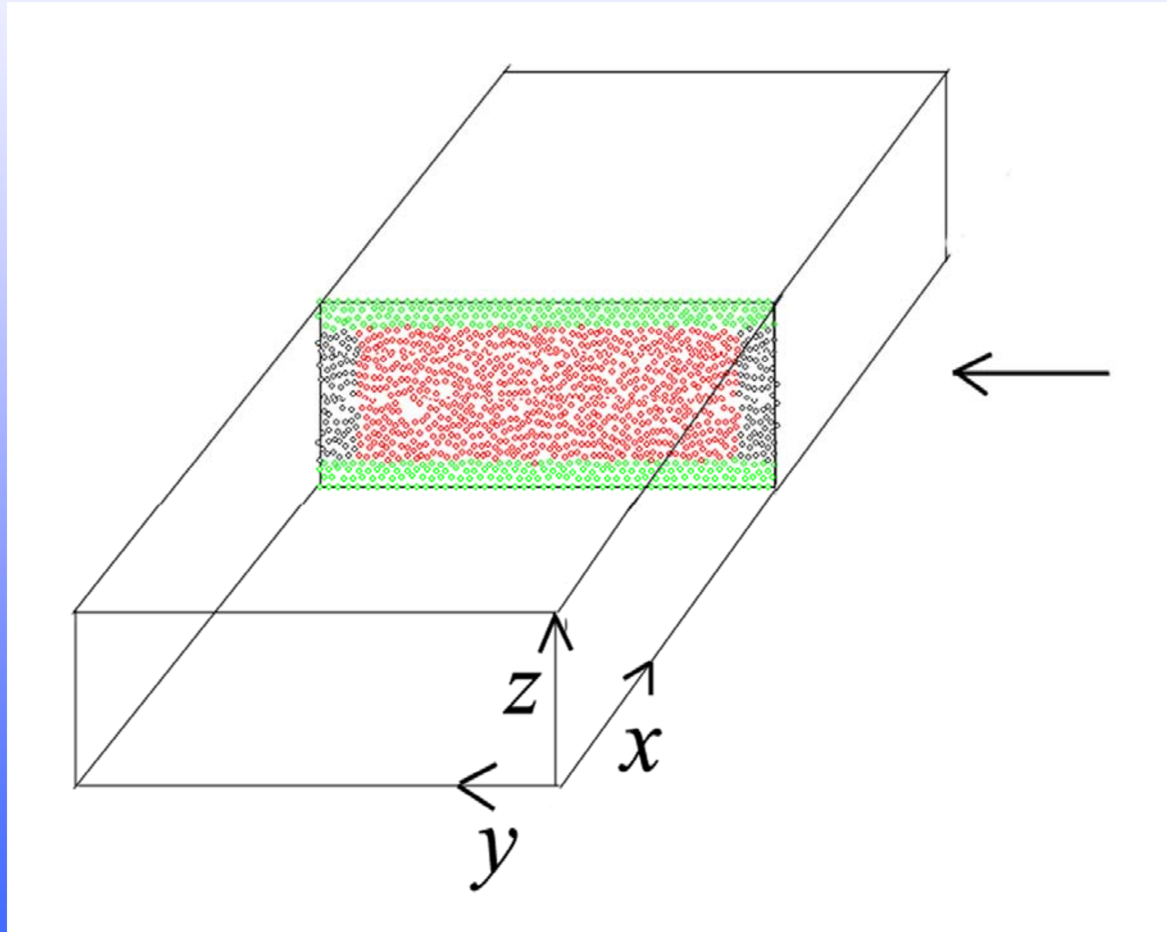


water flow in silica nanopipe
D
L
silica
water
Velocity(mm.s-1)
10
0
-D/2
0
D/2
r(nm)

矩形截面管内流动问题



缝隙流动问题



纳米级低速流动的界定

低速流动：流动速度 < 5 $m.s^{-1}$

低速流动 $\neq$ 低雷诺数

$$\mathrm{Re} = \frac{vd\rho}{\mu}$$

低速流动研究的必要性

1，大部分纳米级流动的实际问题为低速流

2，即使是高速流动，在边界附近也是低速流

低速流动问题中的主要难点

速度的通用算法

$$\mathbf{v}^{e} = \lim_{N_t \to \infty} \frac{1}{N_t} \sum_{k=1}^{N_t} \mathbf{v}_k = \lim_{N_t \to \infty} \frac{1}{N_t} \sum_{k=1}^{N_t} (\mathbf{v}_k^{T} + \mathbf{v}_k^{e})$$

该算法成立的条件

$$\mathbf{v}^{T} = \lim_{N_t \to \infty} \frac{1}{N_t} \sum_{k=1}^{N_t} \mathbf{v}_k^{T} = 0$$

实际情况是:

$$\mathbf{v}^{T} = \lim_{N t \to \infty} \frac{1}{N_{t}} \sum_{k=1}^{N t} \mathbf{v}_{k}^{T} \neq 0$$

因为:

1，计算误差

2，布朗运动 的影响

低速流动速度计算的新方法

（1）线性叠加法

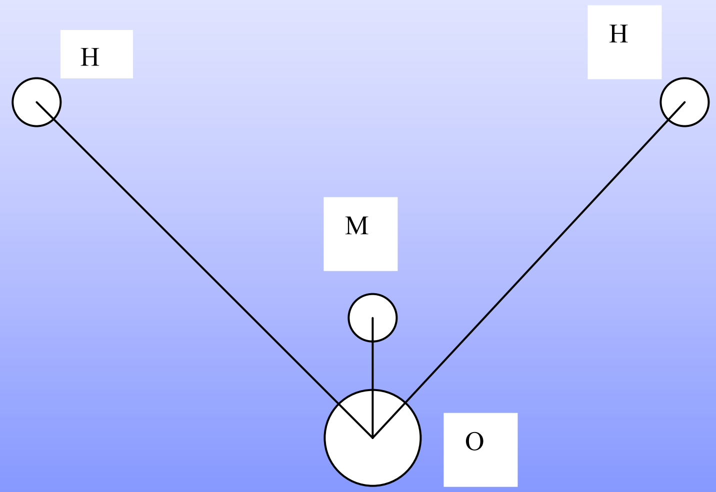
对MD方法中的外力函数进行线性展开，
将外力增量从总的力的增量中分离出来，
然后求得由外力增量引起的流动速度增量…

$$\mathbf{v}_{ik} = \mathbf{v}^{T}_{ik-1} + \mathbf{v}^{e}_{ik-1} + \Delta\mathbf{v}^{T}_{ik-1} + \Delta\mathbf{v}^{e}_{ik-1}$$

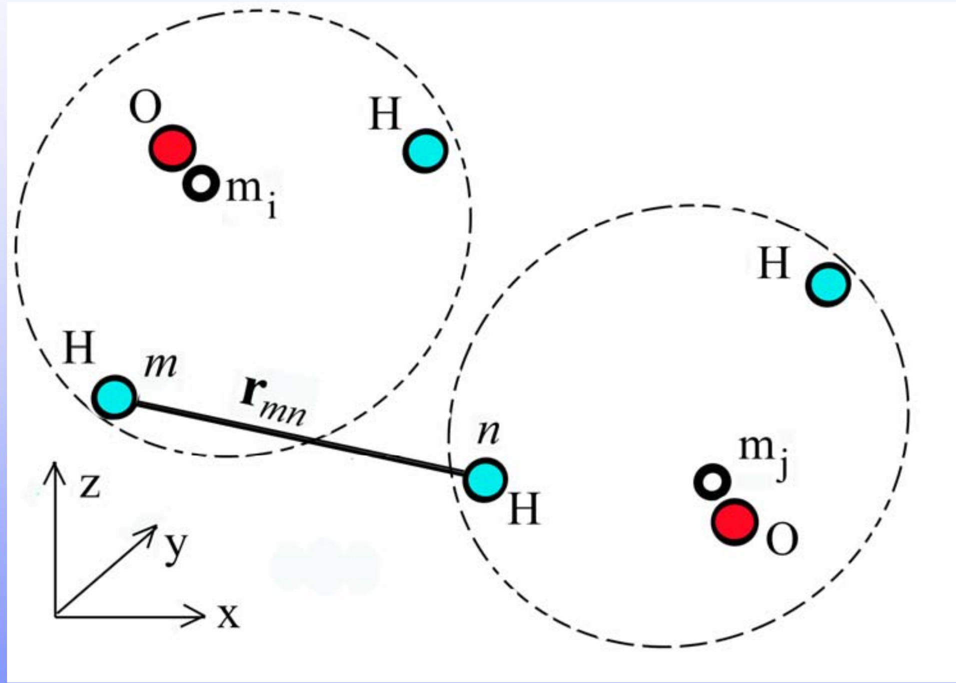
$$\mathbf{v}^{e}_{ik} = \mathbf{v}^{e}_{ik-1} + \Delta\mathbf{v}^{e}_{ik-1} = \mathbf{v}^{e}_{ik-1} + \frac{\mathbf{F}^{e}_{ik}}{m_i}\Delta t$$

$$\mathbf{F}_{ik} = \mathbf{F}^{T}_{ik} + \mathbf{F}^{e}_{ik}$$

水分子的模型

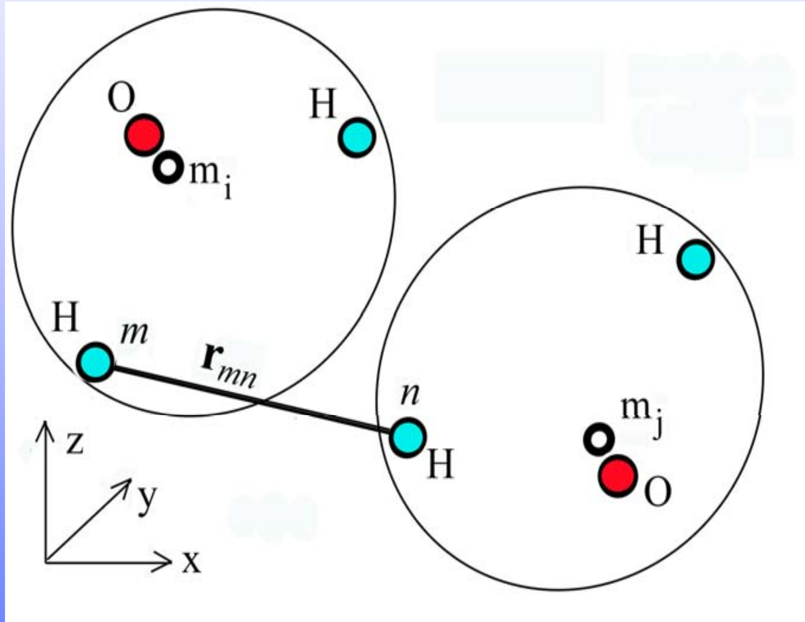


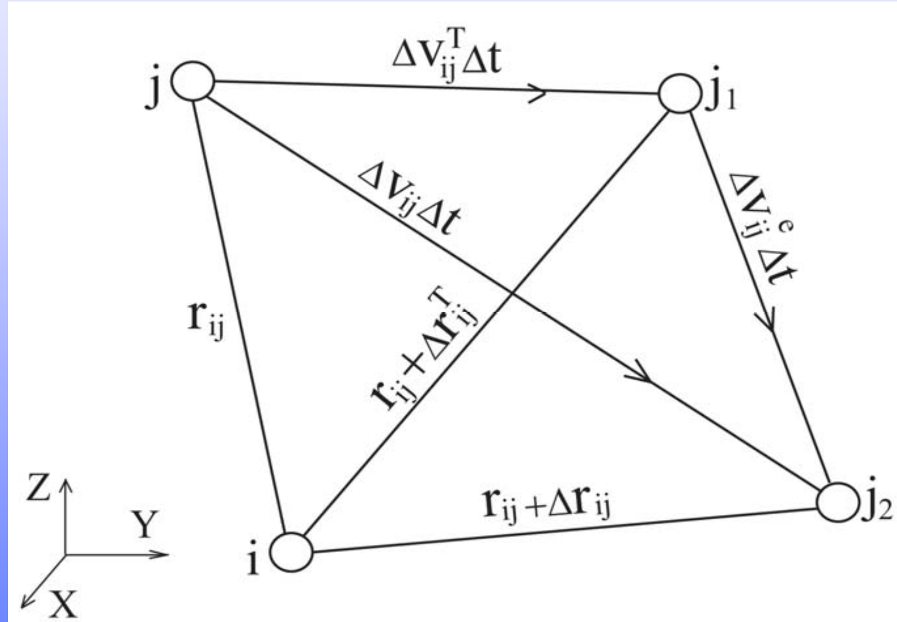
水分子的力学模型



$$u(r_{12}) = 4\varepsilon_{oo}[(\frac{\sigma_{oo}}{r_{12}})^{12} - (\frac{\sigma_{oo}}{r_{12}})^{6}] + \frac{1}{4\pi}\sum_i \sum_j \frac{q_i q_j}{\varepsilon_0 r_{ij}}$$

分子间的运动关系


O
H
m_i
H
H
m
$\mathbf{r}_{mn}$
n
m_j
H
O
z
y
x


j
$\Delta V_{ij}^{T}\Delta t$
j_1
$\Delta V_{ij}\Delta t$
$\Delta V_{ij}^{e}\Delta t$
r_{ij}
$r_{ij}+\Delta r_{ij}^{T}$
$r_{ij}+\Delta r_{ij}$
j_2
i
Z
Y
X

分子间的作用力的推导

$$\mathbf{v}_i^e = \sum_{k=1}^{N_t} \Delta \mathbf{v}_{ik\text{-}1}^e = \sum_{k=1}^{N_t} \frac{\mathbf{F}_{ik}^e}{m_i} \Delta t$$

$$\mathbf{F}_{\mathrm{ij}}^{\mathrm{T}} + \mathbf{F}_{\mathrm{ij}}^{\mathrm{eI}} = -\nabla u(r_{\mathrm{ij}}) = -\frac{\partial u(r_{\mathrm{ij}})}{\partial r_{\mathrm{ij}}} \frac{\mathbf{r}_{\mathrm{ij}}}{r_{\mathrm{ij}}}$$

$$\mathbf{F}_{ik}^e = \mathbf{F}_{ik}^{eI} + \mathbf{F}_{ik}^{eII}$$

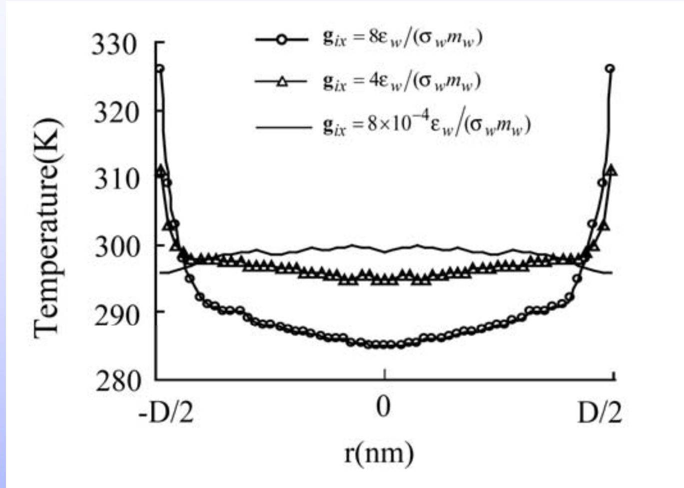
$$\mathbf{F}_{ik}^{eI} = \sum_j \mathbf{F}_{ijk}^{eI} = \mathbf{F}_{ik\text{-}1}^{eI} + \sum_j \Delta\mathbf{F}_{ijk\text{-}1}^{eI}$$

$$\mathbf{F}_{ik}^{eI} = \mathbf{F}_{ik\text{-}1}^{eI} - \sum_j \sum_m \sum_n [\frac{\partial^2 u(r_{mn})}{(\partial r_{mn})^2} \Delta r_{mnk-1}^{e} \frac{\mathbf{r}_{mnk\text{-}1}}{r_{mnk\text{-}1}} - \frac{\partial u(r_{mn})}{\partial r_{mn}} \frac{1}{r_{ijk-1}} (\Delta\mathbf{r}_{mnk-1}^{e} - \Delta r_{mnk-1}^{e} \frac{\mathbf{r}_{mnk-1}}{r_{mnk-1}}),$$

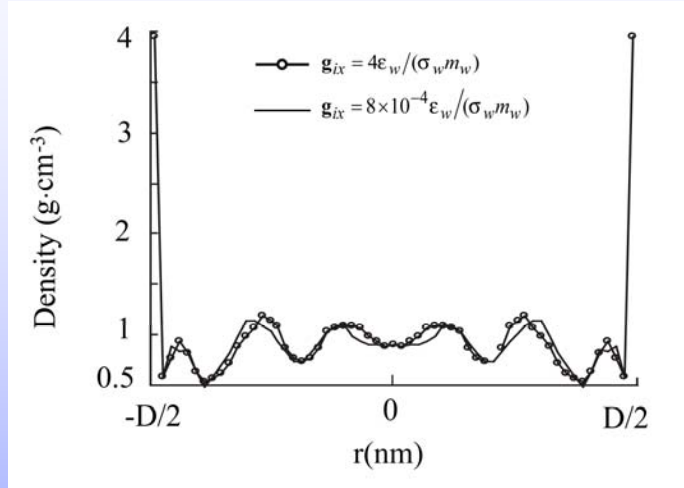
$$= \mathbf{F}_{ik\text{-}1}^{eI} - \sum_j [\frac{\partial^2 u(r_{ij})}{(\partial r_{ij})^2} \Delta r_{ijk-1}^{e} \frac{\mathbf{r}_{ijk\text{-}1}}{r_{ijk\text{-}1}} - \frac{\partial u(r_{ij})}{\partial r_{ij}} \frac{1}{r_{ijk-1}} (\Delta\mathbf{r}_{ijk-1}^{e} - \Delta r_{ijk-1}^{e} \frac{\mathbf{r}_{ijk-1}}{r_{ijk-1}})],$$

$$\Delta r_{mnk\text{-}1}^{e} = (\Delta\mathbf{v}_{mnk\text{-}1}^{e} . (2\Delta\mathbf{v}_{mnk\text{-}1} - \Delta\mathbf{v}_{mnk\text{-}1}^{e})\Delta t^2 + 2\Delta t \Delta\mathbf{v}_{mnk\text{-}1}^{e} . \mathbf{r}_{mnk\text{-}1}) / (2 r_{mnk\text{-}1})$$

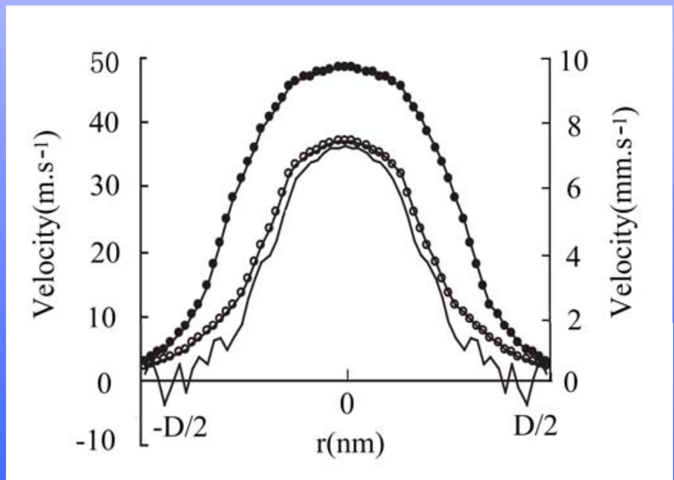
算例



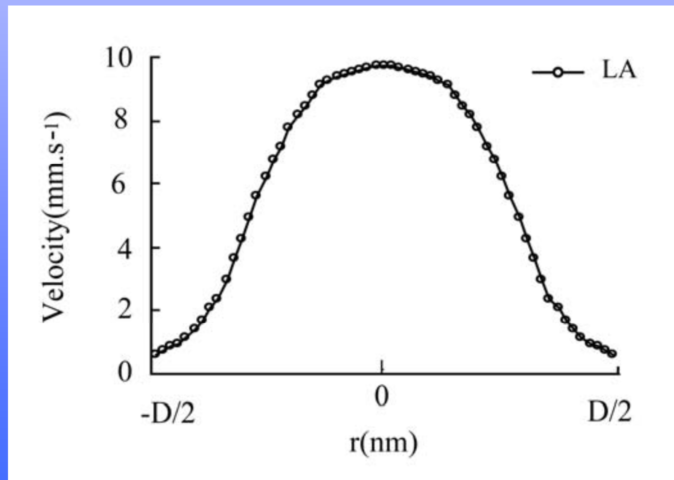
$g_{ix}=8\varepsilon_w/(\sigma_w m_w)$
$g_{ix}=4\varepsilon_w/(\sigma_w m_w)$
$g_{ix}=8\times10^{-4}\varepsilon_w/(\sigma_w m_w)$
Temperature(K)
330
320
310
300
290
280
-D/2
0
D/2
r(nm)



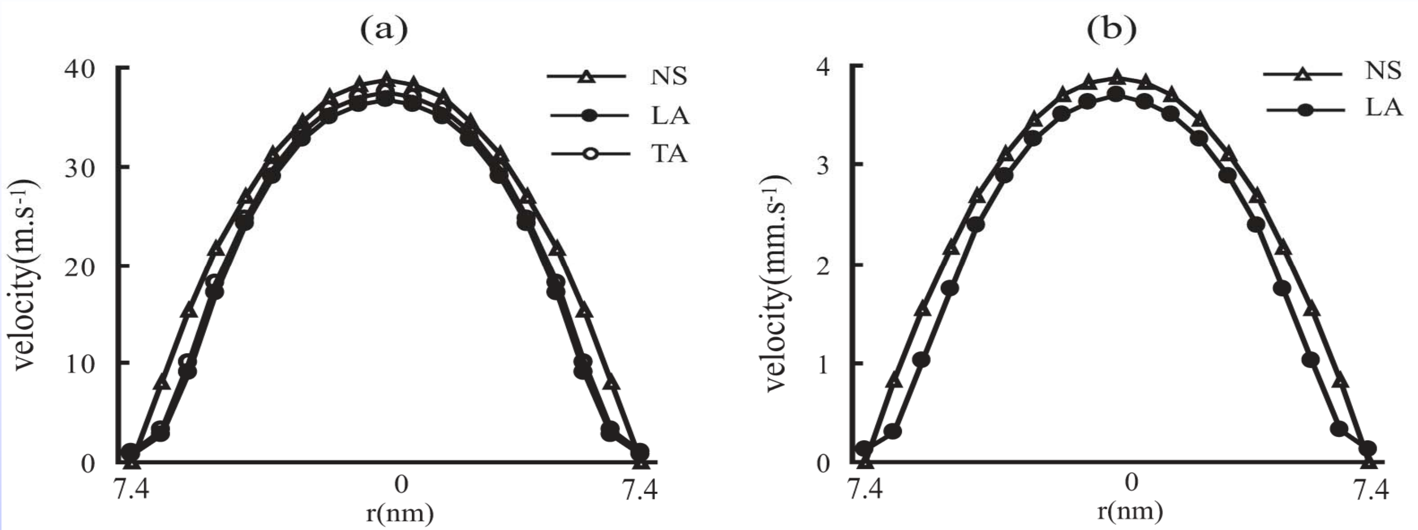
$g_{ix}=4\varepsilon_w/(\sigma_w m_w)$
$g_{ix}=8\times10^{-4}\varepsilon_w/(\sigma_w m_w)$
Density ($g\cdot cm^{-3}$)
4
3
2
1
0.5
-D/2
0
D/2
r(nm)

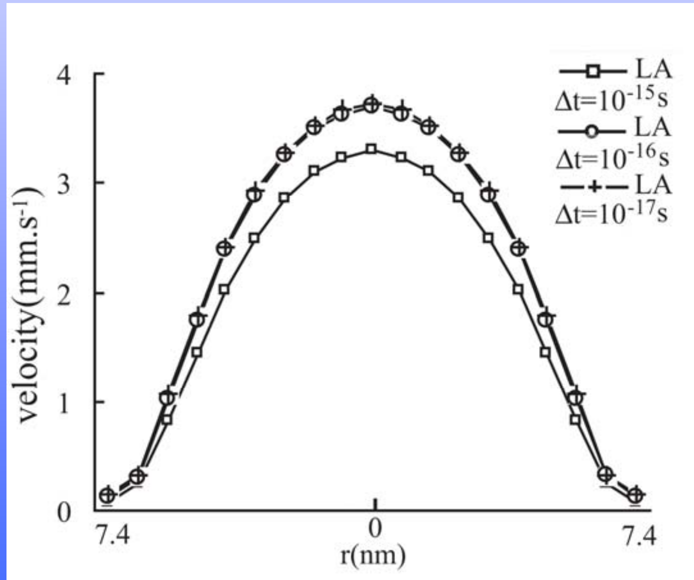


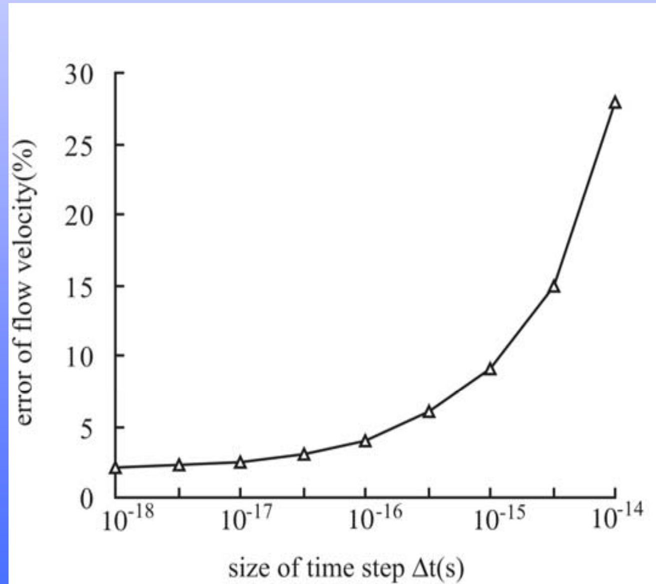
Velocity($m.s^{-1}$)
50
40
30
20
10
0
-10
Velocity($mm.s^{-1}$)
10
8
6
4
2
0
-D/2
0
D/2
r(nm)



LA
Velocity($mm.s^{-1}$)
10
8
6
4
2
0
-D/2
0
D/2
r(nm)







$$\left|(v_{maxLA} - v_{maxTA})/v_{maxTA}\right| \times 100\%$$

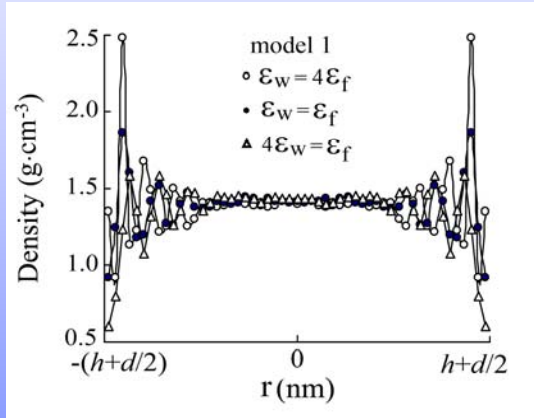
低速流动速度计算的新方法

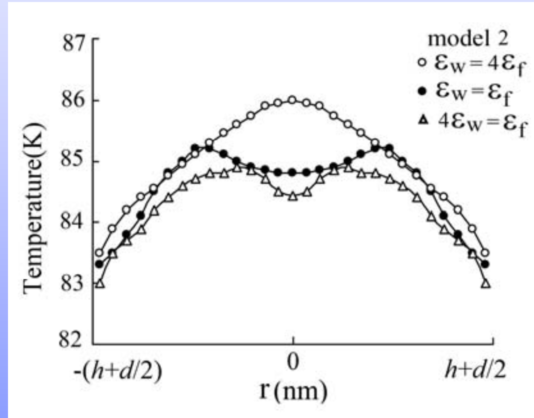
（2 ）空间线性化法

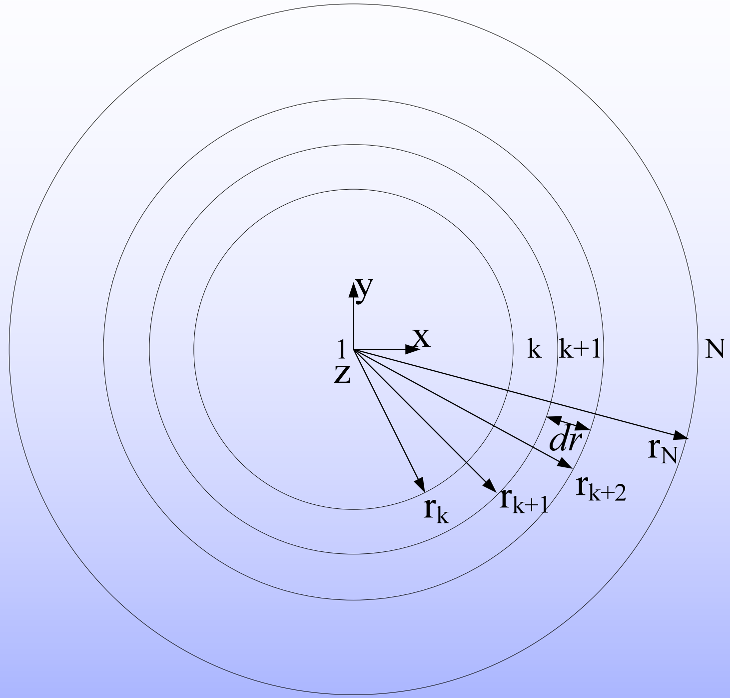
根据流体力学中粘度、切应力和流速增量的关系（对于牛顿流体即牛顿内摩擦定律)先用分子动力学方法算出流体的粘度和切应力（即使是稳态流，粘度和切应力也是随空间位置而变化的），然后求出流动速度。

$$\tau = \mu \frac{dv}{dy}$$

物理参数分布的非均匀性







$$\tau = \mu \frac{dv}{dr}$$

$$dv = \frac{\tau}{\mu} dr \quad \Rightarrow \quad v_{k+1} = v_k + \frac{\tau_k}{\mu_k}(r_{k+1} - r_k)$$

分子动力学和宏观物理参数的关系

↓

统计物理学和统计力学

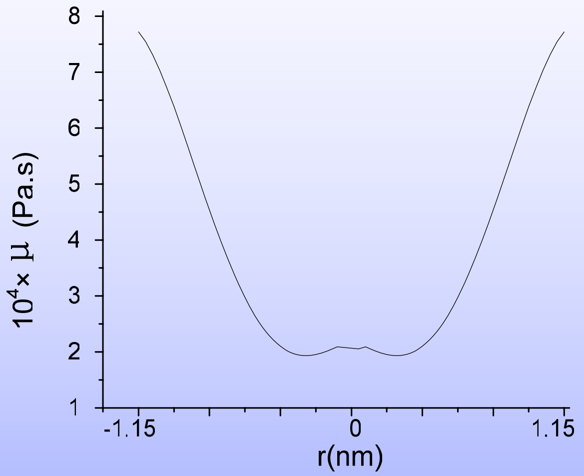
应力

$$\sigma^{\alpha\beta} = \frac{1}{V}\left(\sum_i m_i v_i^{\alpha} v_i^{\beta} - \frac{1}{2}\sum_i \sum_j r_{ij}^{\alpha} f_{ij}^{\beta}\right)$$

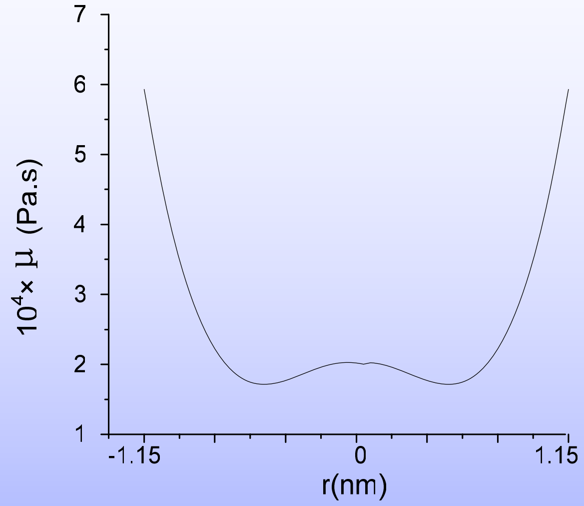
粘度

$$\mu = \frac{V}{3k_B T}\int_0^{\infty}\sum_{\alpha}\sum_{\beta}\left\langle \sigma^{\alpha\beta}(0)\sigma^{\alpha\beta}(t)\right\rangle dt$$

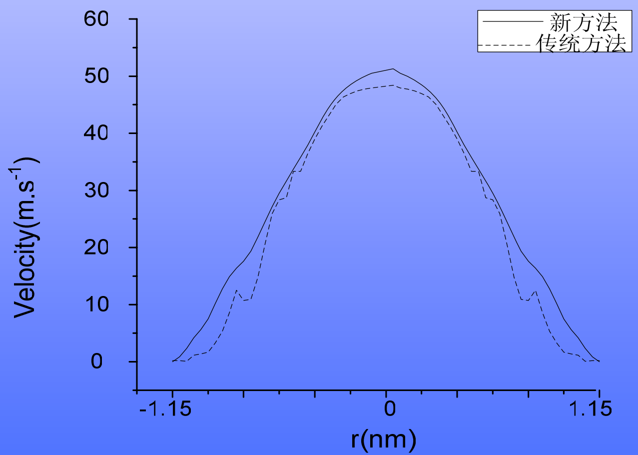
算例



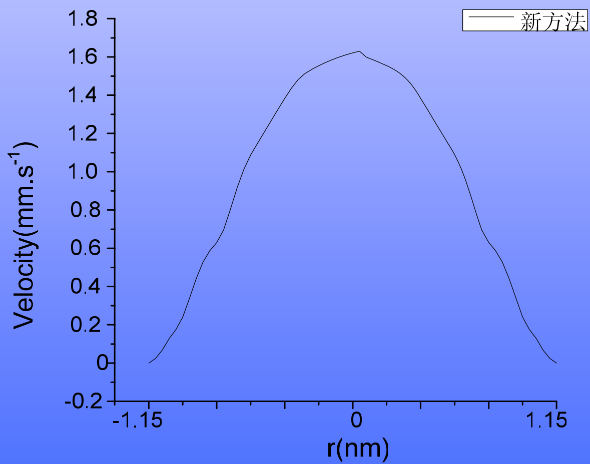
8
7
6
5
4
3
2
1
$10^4\times\mu$ (Pa.s)
-1.15
0
1.15
r(nm)



7
6
5
4
3
2
1
$10^4\times\mu$ (Pa.s)
-1.15
0
1.15
r(nm)



新方法
传统方法
60
50
40
30
20
10
0
Velocity(m.s^{-1})
-1.15
0
1.15
r(nm)



新方法
1.8
1.6
1.4
1.2
1.0
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
Velocity(mm.s^{-1})
-1.15
0
1.15
r(nm)

问题和讨论

第一种方法:

1，计算速度快，

2，可以方便地计算出边界滑移，

3，稳定性较差。

第二种方法:

1，计算速度慢，

2，不能计算边界滑移，

3，稳定性好。

计划将这两种方法结合在一起应用。

1. Zhang W., Velocity extraction method in molecular dynamic simulation of low speed nanoscale flows, *Int. J. of molecular science*, 2006, 7:405-416.（SCI，影响因子 1.153）

2. Zhang W., Li D., Simulation of low speed 3D nanochannel flow, *Microfluidics & Nanofluidics*, 2007, 3:417-425. （SCI，影响因子 3.314）

3. Zhang W., Multi-constrains in constant temperature molecular dynamics simulation of nanoflow, *Chemical Physical Letters*, 2007, 439:219-223.（SCI，影响因子2.341）

4. Zhang W., Xia D., Examination of nanoflow in rectangular slits, *Molecular Simulation*, 2007, 33(15):1223-1228. （SCI，影响因子 1.325）

5. Zhang W., Li D., Low Speed Water Flow in Silica Nanochannel**,** *Chemical Physical Letters*, 2008, 450:422-425. （SCI，影响因子 2.341）

谢谢