

文章编号: 1007-2861(2009)06-0628-06

# 耗散粒子动力学中实现滑移边界条件的数值方法

李 振, 胡国辉, 周哲玮

(上海大学 上海市应用数学和力学研究所, 上海 200072)

**摘要:** 流体在固体表面的速度滑移对宏观流动的影响通常可以忽略,但在研究微尺度流动时,滑移速度可能对流动产生较大的影响. 因此在研究微尺度流动时,需要考虑流动在边界上的滑移. 耗散粒子动力学方法是模拟介观尺度下流体的动力学行为的计算方法,目前该方法一般使用无滑移的边界条件. 提出一种在耗散粒子动力学中实现滑移边界条件的数值方法,得到了和 Navier 滑移边界条件的 Poiseuille 流精确解吻合的速度剖面.

**关键词:** 滑移; 边界条件; 耗散粒子动力学; 介观尺度

中图分类号: O 357

文献标志码: A

## A Numerical Method for Imposing Slip Boundary Conditions in Dissipative Particle Dynamics

LI Zhen, HU Guo-hui, ZHOU Zhe-wei

(Shanghai Institute of Applied Mathematics and Mechanics, Shanghai University, Shanghai 200072, China)

**Abstract:** Velocity slippage on a solid wall is usually neglected in macroscopic flow. However, the effect of slippage on the fluid dynamics can be significant in a microscopic scale. Therefore, slip condition at solid boundary should be considered in microscopic or mesoscopic hydrodynamics. Dissipative particle dynamics (DPD) is a promising approach to the study of mesoscale hydrodynamic behaviors. No-slip boundary conditions are widely used in previous DPD simulations. A numerical method for imposing slip boundary conditions was proposed in the DPD simulation. To show validity of the approach, velocity profiles obtained by DPD are found to be consistent with the analytic solutions based on Navier condition for the Poiseuille flow.

**Key words:** slip; boundary conditions; dissipative particle dynamics; mesoscopic

在宏观尺度下,人们通常认为粘性流体在固壁处满足无滑移边界条件,即流体在壁面上的速度与固壁的速度相等,但在微观领域无滑移边界已经被实验证实是不准确的.事实上,1738年 Bernoulli 首次提出流体流动的无滑移边界条件并不是基于物理

定律,而是基于实验经验的一个假设.1823年, Navier 认为流体在固体表面上可以存在滑移,并提出了线性滑移边界条件的假设,指出在固壁边界上流体的切向速度分量与该处的切应力成正比,即  $u = \beta(du/dy)$ ,其中  $\beta$  为滑移长度或滑移系数.当

收稿日期:2009-07-03

基金项目:国家自然科学基金资助项目(10772107);上海市科技发展基金资助项目(071605102);上海市基础研究重点资助项目(08JC1409800)

通信作者:周哲玮(1950~),男,教授,博士生导师,博士,研究方向为微流动和界面稳定性. E-mail:zhwzhou@shu.edu.cn

$\beta=0$ 时,就成为无滑移边界条件;如果 $\beta$ 为一个有限值,则在固壁处流体存在速度滑移。

在很长的一段时间内,对于选取什么样的边界条件一直存在很大的争议. 由于以前的实验观测技术很难检测出流体在固壁上是否产生了滑移,并且大量的宏观实验证实基于无滑移边界条件得到的流场是足够准确的. 因此,该边界条件被广泛应用在工程实践中。

近年来,随着实验技术的进步,一些实验已经可以测量出流体在固体表面流动时的滑移<sup>[1]</sup>. Watanabe等<sup>[2]</sup>用热膜测速确认流体在流经疏水道时,在壁面上产生了滑移,得到的速度剖面和 Navier 的滑移边界条件下的速度剖面吻合. 随后,又有很多工作研究流动在壁面上发生滑移的问题<sup>[3-7]</sup>. 目前,人们普遍承认边界滑移确实存在,滑移长度在几十纳米到几微米之间。

考虑两无限大平板间的 Stokes 流动,若流体在固壁上满足 Navier 提出的线性滑移边界条件假设,可以得到这种流动的解析解

$$u = \frac{d^2}{8\nu} \left( -\frac{dp}{dx} \right) \left( 1 - \left( \frac{2y}{d} \right)^2 + \frac{4\beta}{d} \right), \quad (1)$$

式中, $\nu$ 为流体的运动学粘性, $\frac{dp}{dx}$ 为压力梯度, $d$ 为平板间的距离, $\beta$ 为滑移长度, $(1 - (2y/d)^2)$ 为无滑移边界条件下 Stokes 流的精确解, $4\beta/d$ 为线性滑移边界条件产生的影响,它的大小取决于滑移长度 $\beta$ 与平板间距 $d$ 的比值. 当 $d$ 为宏观尺度时, $\beta/d$ 很小,因此滑移的影响可以被忽略. 随着平板间距 $d$ 的减小,滑移的影响将会越来越大. 如果 $d$ 的尺度在微米甚至纳米量级的时候,滑移对流动产生的影响将不能被忽略. 因此,对微流体器件中的流动来说,滑移速度可能是非常重要的。

耗散粒子动力学(dissipative particle dynamics, DPD)是一种研究介观尺度流动问题的重要模拟方法. 目前耗散粒子动力学在构造固壁边界时,通常将固壁处理为无滑移的边界,这对研究某些有滑移的流动造成一些困难. 本工作提出一种在耗散粒子动力学中实现滑移边界条件的数值方法,用来模拟具有滑移边界条件的微流动。

## 1 耗散粒子动力学方法

最早的介观方法是格子气自动机(lattice gas automata, LGA)方法. 格子气自动机的基本思想是把

计算区域分成许多均匀的网格,而那些只有质量无体积的粒子只能在网格点上存在,并沿着网格线在网格间运动. 当某一个粒子从某一网格点到邻近的网格点时,有可能与从其他网格点到达该点的粒子相碰撞,碰撞满足质量、动量守恒等规则. 根据碰撞规则,粒子碰撞后再散射出去,演化为新的运动粒子流向各节点的邻居,形成格子气自动机. 然而,由于人为网格的引入,使得 LGA 方法出现了两个基本的缺陷,即各向同性和伽利略不变性都被破坏。

1992年,Hoogerbrugge和Koelman<sup>[8]</sup>为了消除 LGA 方法中的人工网格,将 LGA 和分子动力学(molecular dynamics, MD)方法结合起来,提出了一种无网格的介观方法. 该方法既保留了 MD 中的无网格优势,也采用了 LGA 中较大的时间步长,称之为耗散粒子动力学方法. 算法中粒子采用 MD 一样的拉格朗日坐标描述,粒子运动满足牛顿运动方程,其运动方程中粒子之间的作用既包括颗粒间的有势作用力,也考虑了类似于布朗动力学(Brownian dynamics, BD)中的随机力和耗散力。

### 1.1 耗散粒子动力学的理论模型

一个 DPD 颗粒以它所在的空间位置 $\mathbf{r}_i$ 、速度 $\mathbf{v}_i$ 和颗粒质量 $m_i$ 来标识. 若将 DPD 颗粒的质量 $m_i$ 选取为无量纲质量,即 $m_i \equiv m \equiv 1$ ,粒子运动满足牛顿运动方程

$$\frac{d\mathbf{r}_i}{dt} = \mathbf{v}_i, \quad \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} = \mathbf{F}_i + \mathbf{F}^e, \quad (2)$$

式中, $t$ 为时间, $\mathbf{F}_i$ 为粒子 $i$ 受到其他粒子作用的合力, $\mathbf{F}^e$ 为粒子 $i$ 受到来自外部力场的作用. 若将 $\mathbf{F}_i$ 分为有势力、耗散力和随机力3种不同类型的作用,则

$$\mathbf{F}_i = \sum_{i \neq j} (\mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R), \quad (3)$$

式中, $\mathbf{F}_{ij}^C$ 为保守力(来源于第 $j$ 个粒子对粒子 $i$ 的作用势), $\mathbf{F}_{ij}^D$ 为耗散力, $\mathbf{F}_{ij}^R$ 为随机力. 所有的力都成对出现,这样保证了系统的动量守恒,并且在截断半径 $r_c$ 之外这些力均为0。

模型粒子之间的有势力用一种软排斥力来描述<sup>[9]</sup>,

$$\mathbf{F}_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij}(1 - r_{ij})\mathbf{e}_{ij}, & r_{ij} \leq 1; \\ 0, & r_{ij} > 1, \end{cases} \quad (4)$$

式中, $a_{ij}$ 为排斥力参数,它的值等于粒子 $i$ 与粒子 $j$ 之间最大的排斥力; $r_{ij}$ 为粒子 $i$ 与粒子 $j$ 之间的位移; $\mathbf{e}_{ij}$ 为 $r_{ij}$ 的单位矢量,即 $\mathbf{e}_{ij} = \mathbf{r}_{ij}/|\mathbf{r}_{ij}|$ , $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ .

随机力和耗散力分别为<sup>[9]</sup>

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{ij}^D &= -\gamma\omega^D(\mathbf{r}_{ij})(\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij})\mathbf{e}_{ij}, \\ \mathbf{F}_{ij}^R &= \sigma\omega^R(\mathbf{r}_{ij})\theta_{ij}\mathbf{e}_{ij}, \end{aligned} \quad (5)$$

式中,  $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$ ,  $\mathbf{e}_{ij}$  为  $\mathbf{r}_{ij}$  的单位矢量,  $\gamma$  为耗散幅值,  $\sigma$  为随机力幅值,  $\omega^D$  和  $\omega^R$  为与相对位置有关的权重函数,  $\theta_{ij}$  为高斯白噪声项, 满足  $\theta_{ij} = \theta_{ji}$ , 且满足统计学特性

$$\begin{cases} \langle \theta_{ij}(t) \rangle = 0, \\ \langle \theta_{ij}(t)\theta_{kl}(t') \rangle = (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})\delta(t-t'). \end{cases} \quad (6)$$

Espanol 和 Warren<sup>[10]</sup> 提出耗散力和随机力中的权重函数必须满足耗散涨落定理, 从而奠定了 DPD 模拟方法的基础. 根据耗散涨落定理, 耗散力和随机力必须满足<sup>[10]</sup>

$$\omega^D(r) = [\omega^R(r)]^2, \quad \sigma^2 = 2\gamma k_B T. \quad (7)$$

一般权重函数选取为与有势力类似的表达式:

$$\omega^D(r) = (\omega^R(r))^2 = \begin{cases} (1 - r/r_c)^2, & r \leq r_c; \\ 0, & r > r_c. \end{cases} \quad (8)$$

对于液态水, Groot 和 Warren<sup>[9]</sup> 推荐  $a_{ij} = 75k_B T/\rho$ ,  $\sigma = 3$ , 其中  $\rho$  为 DPD 粒子数密度.

## 1.2 数值积分方法

最初的 DPD 模拟算法是基于欧拉算法, 即

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \Delta t\mathbf{v}_i(t), \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \Delta t\mathbf{f}_i(t), \\ \mathbf{f}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{f}_i(\mathbf{r}(t + \Delta t), \mathbf{v}_i(t + \Delta t)). \end{aligned} \quad (9)$$

由于该算法精度较差, Groot 等人<sup>[9]</sup> 提出了一种修正的 Velocity-Verlet 格式,

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{r}_i(t) + \Delta t\mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2}(\Delta t)^2\mathbf{f}_i(t), \\ \tilde{\mathbf{v}}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \lambda\Delta t\mathbf{f}_i(t), \\ \mathbf{f}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{f}_i(\mathbf{r}(t + \Delta t), \tilde{\mathbf{v}}_i(t + \Delta t)), \\ \mathbf{v}_i(t + \Delta t) &= \mathbf{v}_i(t) + \frac{1}{2}\Delta t(\mathbf{f}_i(t) + \mathbf{f}_i(t + \Delta t)). \end{aligned} \quad (10)$$

这使得计算效率和精度有了较大的改进. 目前绝大多数 DPD 模拟中都采用了这种修正的 Velocity-Verlet 算法. 式(10)中,  $\lambda$  和  $\Delta t$  分别为松弛因子和时间步长. 本工作取  $\lambda = 0.65$ ,  $\Delta t = 0.01$ .

## 1.3 边界条件

目前主要有两种方法可以在 DPD 模型中得到固壁. 第一种是 Revenga 等<sup>[11]</sup> 提出的冻结一部分流体粒子形成固壁. 这些粒子除了不可以移动外, 具有和流体粒子一样的性质, 可以和流体粒子相互作用. 由于 DPD 方法中粒子之间的排斥力为软作用, 冻结

粒子产生的固壁, 不能够防止流体粒子的穿透. 如果流体粒子穿透了固壁, 可以有以下几种方式将流体粒子反射回计算区域, 如图 1 所示.

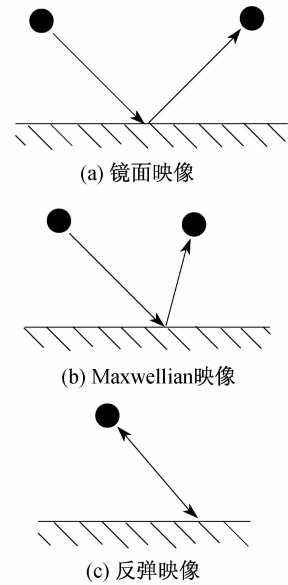


图 1 将穿透固壁的流体粒子返回计算域的方法  
Fig. 1 Three methods to reflect particles back into computational domain after wall penetration

图 1 中, 镜面映像将粒子返回计算域后, 保持平行于壁面的速度分量不变, 而垂直壁面的速度分量反向; Maxwellian 映像得到的粒子速度满足以壁面速度  $V_{\text{wall}}$  为中心的 Maxwellian 分布; 反弹映像 (Bounce-back reflection) 将平行壁面的速度分量和垂直于壁面的速度分量都反向.

Revenga 等<sup>[11]</sup> 研究了以上三种映射方式, 发现在热扰动相对较小的情况下, 只有第三种方式能得到无滑移的边界条件, 而采用镜面映像和 Maxwellian 映像方式的流动在固壁边界上存在滑移.

第二种办法是 Willemsen 等<sup>[12]</sup> 提出的一种附加层 (extra-layer) 的办法. 他们将所有与壁面距离小于截断长度  $r_c$  的流体粒子, 都以镜像的方法, 附加在计算域之外. 这些附加的粒子与母粒子的速度相反, 能够得到无滑移边界条件. 这种方法得到的是一种虚拟的固壁, 其缺点是在固壁附近, 流体粒子的数密度有较大的波动, 并且目前只适用于平面的固壁边界, 对于曲面边界的处理尚有困难.

目前, DPD 模拟中普遍使用 Revenga 等<sup>[11]</sup> 提出的冻结粒子法得到固壁边界, 并使用反弹映射方式处理流体粒子穿透固壁的问题. Duong 等<sup>[13]</sup> 采用冻

结粒子法,改变固壁粒子的结构,使冻结的两层粒子水平位置相错,使用反弹映射,并通过控制这两层粒子与固壁间的距离得到无滑移边界条件. Pivkin 等<sup>[14]</sup>通过改变流体粒子与固壁粒子间的有势排斥力,也可以得到无滑移的边界条件. 但是在 DPD 模拟介观流动中,如何合理和简便地给出滑移边界条件是尚待研究的问题. 在以往的 DPD 模拟中,被冻结的固壁粒子具有和流体粒子一样的耗散力幅值  $\gamma$ . 本工作通过考虑流体粒子-固壁粒子间的耗散力幅值  $\gamma_{fw}$  与流体粒子-流体粒子间的耗散力幅值  $\gamma_{ff}$  不同,即考虑固壁的材料不同于流体材料,得到一种实现滑移边界条件的方法.

## 2 DPD 模拟

考虑无限长平板间的 Poiseuille 流动(见图 2),上下边界为固壁边界,采用反弹映射方式处理粒子穿透固壁问题,左右边界为周期性边界条件. 固壁粒子数密度和流体粒子数密度均为  $\rho = 3$ ,有 4 200 个流体粒子分布在  $40.41 \times 34.64$  的计算域中,固壁粒子数为 280. 流体粒子受到沿  $x$  轴正向的一个体力作用,  $g = 0.01$ ,相当于流体受到沿  $x$  轴方向,大小为  $F^e = g \cdot \Delta x$  的一个驱动力. DPD 计算中的参数采用 Groot 等<sup>[9]</sup>推荐的参数:  $k_B T = 1.0$ ,粒子间的保守力幅值  $a_{ij} = 25$ ,流体粒子-固体粒子间的耗散力幅值为  $\gamma_{fw}$ ,流体粒子-流体粒子间的耗散力幅值为  $\gamma_{ff}$ ,随机力幅值  $\sigma$  由方程(7)得到.

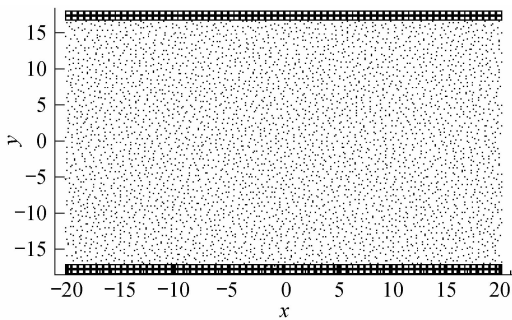


图 2 DPD 模拟的模型

Fig. 2 Model of DPD simulation

Groot 等<sup>[9]</sup>给出一种估算流体运动学粘性近似值的方法,

$$\nu \approx \frac{45k_B T}{4\pi\gamma_{ff}\rho r_c^3} + \frac{2\pi\gamma_{ff}\rho r_c^5}{1575}. \quad (11)$$

由以上计算参数可以得到流体的运动学粘度近似值为 0.319 1. 本工作将计算域在  $y$  方向划分为 100

个子区域,并将达到稳定态的计算结果在这些子区域中经过时间平均,以得到流场的速度分布情况.

Pivkin 等<sup>[14]</sup>通过增加固壁粒子的保守力系数  $a_w$  或固壁粒子的数密度  $\rho_w$ ,得到了有滑移的 Poiseuille 流动. 本工作选取固壁粒子的保守力系数  $a_w$  为流体粒子的保守力系数的 3 倍,即  $a_w = 3a_{ij} = 75$ ,固壁粒子数密度和流体粒子数密度相等,  $\rho_w = \rho = 3$ ,随机力幅值  $\sigma = 3.0$ ,耗散力幅值  $\gamma = 4.5$ ,可以得到有滑移的 Poiseuille 流动,速度剖面如图 3 所示,流动在边界上有较大的滑移速度. 通过对流体粒子数密度的分析(见图 4),流体粒子在壁面附近的数密度为零. 这意味着增大固壁排斥力致使流体粒子不能充分靠近固壁,在流体和固壁之间存在一段间隙,相当于减小了管道宽度,且人为地增加了管道中流体的密度,使得计算参数和预设参数不一致.

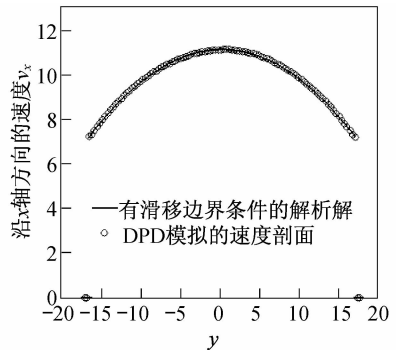


图 3  $a_w = 3a_{ij}, \rho_w = \rho$  得到的速度剖面

Fig. 3 Velocity profile of  $a_w = 3a_{ij}, \rho_w = \rho$

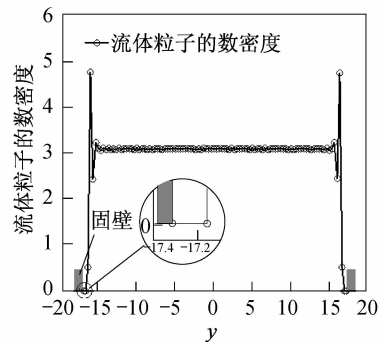


图 4  $a_w = 3a_{ij}, \rho_w = \rho$  对应的流体密度剖面

Fig. 4 Density profile of  $a_w = 3a_{ij}, \rho_w = \rho$

通过增加固壁粒子的数密度  $\rho_w$ ,也可以达到同样的效果. 选取固壁粒子数密度为流体粒子数密度的 3 倍,即  $\rho_w = 3\rho = 9$ ,固壁粒子的保守力系数  $a_w$  与流体粒子的保守力系数相等,  $a_w = a_{ij}$ ,随机力幅值  $\sigma = 3.0$ ,耗散力幅值  $\gamma = 4.5$ ,得到的速度剖面如图 5

所示,流体粒子的数密度在  $y$  方向的分布如图 6 所示.可以看出,尽管流动在固体边界上出现了明显的滑移,但与增加固壁排斥力类似,流体和固壁之间存在一段间隙,使流体粒子无法充分靠近固壁.

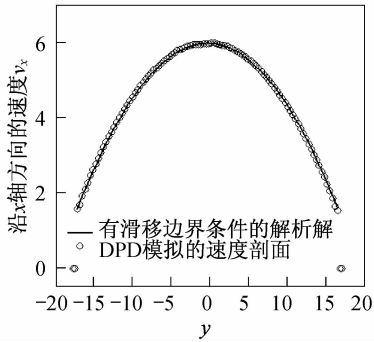


图 5  $a_w = a_{ij}, \rho_w = 3\rho$  对应的速度剖面

Fig. 5 Velocity profile of  $a_w = a_{ij}, \rho_w = 3\rho$

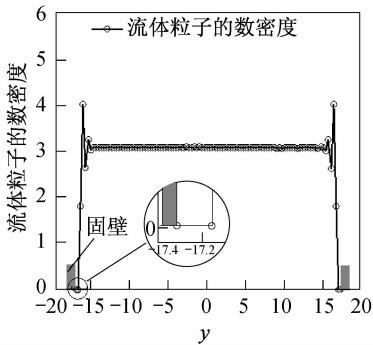


图 6  $a_w = a_{ij}, \rho_w = 3\rho$  对应的流体密度剖面

Fig. 6 Density profile of  $a_w = a_{ij}, \rho_w = 3\rho$

虽然以上两种方法都可以得到滑移边界条件,但由于它们本质上都是利用固壁产生较大的排斥力,使流体粒子无法充分靠近固壁而产生滑移.这与真实的物理过程有一定的差异,从而不易准确控制流动在固壁上的滑移.本工作建议另一种实现滑移边界条件的方法,考虑到固壁材料性质不同于流体性质,即流体粒子-固壁粒子之间的耗散力系数  $\gamma_{fw}$  不同于流体粒子-流体粒子之间的耗散力系数  $\gamma_{ff}$ ,通过参数  $\gamma_{fw}$  来控制边界上产生的滑移.

### 2.1 $\gamma_{fw}$ 和 $\gamma_{ff}$ 相等的情况

选取  $\gamma_{fw} = \gamma_{ff} = 4.5$ ,由方程(7)可以得到相应的随机力幅值.保守力函数选择为方程(4)的形式,耗散力权函数和随机力权函数选择如方程(8).计算得到的速度剖面如图 7 所示.这样的速度剖面与充分发展的 Navier 线性滑移边界条件下的 Poiseuille 流动速度剖面  $u = V_{\max} \left( 1 - \left( \frac{2y}{d} \right)^2 \right) + V_{\text{slip}}$  吻合,式中

$V_{\text{slip}} = 0.3023$  为流体在固壁表面上的滑移速度.将 DPD 模拟得到的速度剖面与 Poiseuille 流的精确解相对照,可以计算出流体的运动学粘度  $\nu = 0.3246$ ,与方程(11)中通过 DPD 模型参数得到的近似值 0.3191 相比,相对误差仅为 1.6%,对应的滑移长度为  $\beta = 0.5665$ .流体粒子数密度在  $y$  方向的分布如图 8 所示.可以看出,固壁附近流体粒子数密度不为零,说明流体粒子和固壁之间没有间隙,流体粒子可以充分靠近固壁,这样流动的尺寸和预设值相等.

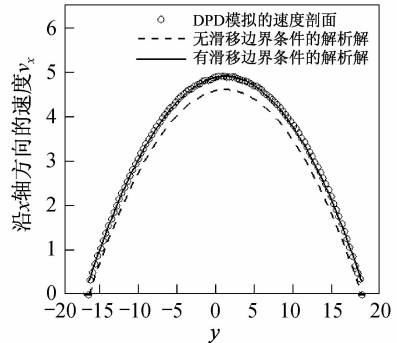


图 7  $\gamma_{fw} = \gamma_{ff} = 4.5$  对应的速度剖面

Fig. 7 Velocity profile of  $\gamma_{fw} = \gamma_{ff} = 4.5, \rho_w = \rho = 3.0$

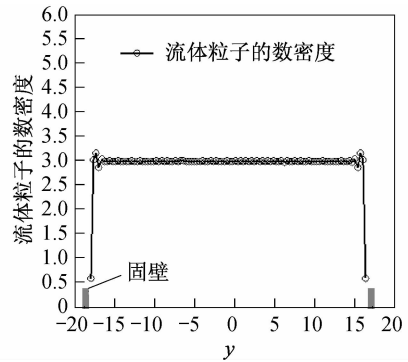


图 8  $\gamma_{fw} = \gamma_{ff} = 4.5$  对应的流体密度剖面

Fig. 8 Density profile of  $\gamma_{fw} = \gamma_{ff} = 4.5, \rho_w = \rho = 3.0$

### 2.2 改变流体粒子-固壁粒子间的耗散力幅值 $\gamma_{fw}$

增加流体粒子-固壁粒子间的耗散力幅值  $\gamma_{fw}$  为  $\gamma_{ff}$  的 3 倍,即  $\gamma_{fw} = 3\gamma_{ff} = 13.5$ ,保持其他计算参数不变,可以得到如图 9 的速度剖面.可以看出,模拟得到的速度剖面和无滑移边界条件的 Navier-Stokes 方程的解析解吻合.说明通过增加流体粒子-固壁粒子的耗散力幅值  $\gamma_{fw}$  能够使得滑移长度  $\beta = 0$ ,即得到无滑移的边界条件.通过 DPD 模拟得到的速度剖面,可以计算出流体的粘性  $\nu = 0.3193$ ,与方程(11)计算得到的粘性系数 0.3191 的误差仅为  $O(10^{-4})$ .

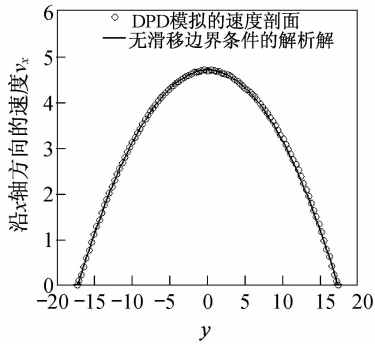


图9  $\gamma_{fw} = 3\gamma_{fr} = 13.5$  对应的速度剖面

Fig. 9 Velocity profile of  $\gamma_{fw} = 3\gamma_{fr} = 13.5, \rho_w = \rho = 3.0$

同样地,减小流体粒子-固壁粒子间的耗散力幅值  $\gamma_{fw} = 2$ ,对应的流体粘性  $\nu = 0.3190$ ,滑移长度  $\beta = 1.0819$ .继续减小流体粒子-固壁粒子间的耗散力幅值  $\gamma_{fw} = 1$ ,对应的滑移长度增大至  $\beta = 1.9404$ .

从以上结果可以看出,  $\gamma_{fw}$  与壁面的滑移长度  $\beta$  有对应的关系,较小的  $\gamma_{fw}$  可以得到较大的滑移长度.因此在耗散粒子动力学模拟中,通过流体粒子-固壁粒子之间的耗散力幅值  $\gamma_{fw}$  的改变,可以很方便地得到滑移或者非滑移边界条件,并控制滑移长度,这对研究涉及滑移边界条件的微流动问题提供了便利.我们将在以后的工作中进一步研究  $\gamma_{fw}$  与壁面的滑移长度  $\beta$  的依赖关系.

### 3 结束语

边界滑移速度通常对宏观流动的影响很小,所以在研究宏观尺度的流动中,普遍使用的是无滑移边界条件.但是对微尺度的流动而言,边界滑移可能对流动有较大的影响.耗散粒子动力学作为一种研究介观尺度流体动力学的模拟方法,有效地实现固壁滑移边界条件是应用于微流动问题时需要考虑的重要问题.本工作提出了一种通过改变流体粒子-固壁粒子间的耗散力幅值,能够很便利地得到滑移边界条件的方法.通过对无限长平板间的 Poiseuille 流动的模拟,得到了和满足 Navier 滑移边界条件的 Poiseuille 流的解析解相吻合的速度剖面,证实了这种实现滑移边界条件的方法的可行性.

### 参考文献:

[1] LAUGA E, BRENNER M P, STONE H A. Microfluidics: the no-slip boundary condition (Chapter 15) [M] // Handbook of Experimental Fluid Dynamics. New York: Springer-Verlag, 2007.

[2] WATANABE K, YANUAR, MIZUNUMA H. Slip of Newtonian fluids at solid boundary [J]. Jsm International Journal Series B: Fluids and Thermal Engineering, 1998, 41(3):525-529.

[3] BARRAT J L, BOCQUET L. Large slip effect at a nonwetting fluid-solid interface [J]. Physical Review Letters, 1999, 82(23):4671-4674.

[4] VINOGRADOVA O I. Slippage of water over hydrophobic surfaces [J]. International Journal of Mineral Processing, 1999, 56(1):31-60.

[5] PIT R, HERVET H, LEGER L. Direct experimental evidence of slip in hexadecane: solid interfaces [J]. Physical Review Letters, 2000, 85(5):980-983.

[6] ZHU Y, GRANICK S. Rate-dependent slip of Newtonian liquid at smooth surfaces [J]. Physical Review Letters, 2001, 87(9):961051-961054.

[7] TRETHERWAY D C, MEINHART C D. Apparent fluid slip at hydrophobic microchannel walls [J]. Physics of Fluids, 2002, 14(3):L9-L12.

[8] HOOGERBRUGGE P J, KOELMAN J M V A. Simulating microscopic hydrodynamic phenomena with dissipative particle dynamics [J]. Europhys Lett, 1992, 19(3):155-160.

[9] GROOT R D, WARREN P B. Dissipative particle dynamics: bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation [J]. J Chem Phys, 1997, 107(11):4423-4435.

[10] ESPANOL P, WARREN P. Statistical mechanics of dissipative particle dynamics [J]. Europhys Lett, 1995, 30(4):191-196.

[11] REVENGA M, ZUNIGA I, ESPANOL P. Boundary model in DPD [J]. International Journal of Modern Physics C, 1998, 9(8):1319-1328.

[12] WILLEMSSEN S M, HOEFSLOOT H C J, IEDEMA P D. No-slip boundary condition in dissipative particle dynamics [J]. International Journal of Modern Physics C, 2000, 11(5):881-890.

[13] DUC D H, NHAN P T, FAN X J. An implementation of no-slip boundary conditions in DPD [J]. Computational Mechanics, 2004, 35(1):24-29.

[14] PIVKIN I V, GEORGE E K. A new method to impose no-slip boundary conditions in dissipative particle dynamics [J]. Journal of Computational Physics, 2005, 207:114-128.