

# 微通道内温度梯度作用下高分子悬浮液流动的 eDPD 模拟

刘汉涛\*, 刘宇翔

(中北大学能源动力工程学院, 太原 030051)

**摘要:**有传热影响的高分子迁移广泛存在于生物和医学工程中,探索热-流耦合机理对推动生物和医学进步具有重要意义。本文将能量守恒耗散粒子动力学(eDPD)方法拓展应用到高分子悬浮液流动问题,对存在温度梯度的微通道壁面间的高分子悬浮液流动进行了模拟,通过对比研究验证了方法的准确性和可靠性。在此基础上,研究了高分子在不同温度梯度下的运动特征,比较分析了高分子悬浮液在不同温度梯度、不同浓度及其耦合作用下的截面速度分布,探讨了温度梯度对高分子分布及拉伸、缠绕、折叠等行为的影响。结果表明,温度梯度对高分子质心概率分布和拉伸特性有明显的影响。这一结果为生物微型器件内生物高分子(药物或DNA)的精确控制与输送提供理论基础,并为研究热与高分子耦合的复杂动力学问题提供了一种新的途径。

**关键词:**能量守恒耗散粒子动力学(eDPD); 高分子; 微流动; 温度梯度; FENE 模型

## 引言

微细加工技术(Micro-fabrication Technology)是以微米、纳米技术(micro/ nanotechnology)为基础发展起来的前沿技术,对生物微型器件的设计与制造具有重要意义。在医学工程中,生物微型器件推动医学研究从宏观表象向微观本质发展,从而实现疾病的准确诊断和有效治疗,如微针可以实现对微小计量生物大分子(药物或DNA)的精确输送。生物大分子在生物微型器件内的流动属于典型的介观尺度流动<sup>[1]</sup>,传统DPD方法广泛应用到生物大分子运动特性的研究。例如,Fan等<sup>[2]</sup>模拟了微通道中DNA悬浮液的流动,模拟结果与Perkins等<sup>[3]</sup>的实验一致;Litvinov等<sup>[4]</sup>探究了微通道中亚浓度高分子悬浮液拉伸流的流变行为,计算得到的稳态速度曲线与Klebinger等<sup>[5]</sup>的实验进行了对比;Millan等<sup>[6]</sup>和许少峰等<sup>[7]</sup>分别探究高分子链在微通道内流动的迁移情况,并得到了相同的结果;周吕文等<sup>[8]</sup>的研究表明高分子链的伸展状态与通道形状密切相关;Fan等<sup>[9]</sup>运用FENE模型模拟高分子链,模拟了Poiseuille流中高分子悬浮液的运动特性,计算结果表明高分子悬浮液的流变特性符合幂律流体流变模型。由于经典DPD方法受模型等温热力学行为的限制,很少有研究者从热力学角度分析高分子的动力学行为。

在真实物理环境中,热量交换和传递广泛存在于生物微型器件中,并对流体及生物大分子(药物或DNA)的动力学行为产生重要的影响<sup>[10,11]</sup>。能量守恒耗散粒子动力学方法(energy-conserving dissipative particle dynamics,eDPD)是Español等在DPD方法的基础上提出来处理热传导问题<sup>[12]</sup>。目前,eDPD方法不断拓展<sup>[13,14]</sup>,并广泛应用到纳米材料热传导<sup>[15]</sup>、声子在薄膜中的热传输<sup>[16]</sup>、伴有放热过程的化学反应<sup>[17,18]</sup>以及水的凝结<sup>[19]</sup>等领域。然而,对温度影响的高分子热-流耦合运动的研究还比较少,仅限于固体热敏高分子材料的膨胀和折叠<sup>[20]</sup>。

eDPD方法不仅能准确处理介观尺度的热力学问题,也具备经典DPD方法计算生物大分子复杂运动形态的能力。因此,本文以eDPD方法为框架,采用有限拉伸非线性弹性(finitely extensible nonlinear elastic,FENE)珠簧链(bead spring chain)模型<sup>[9]</sup>建立高分子链,探究温度梯度作用下,高分子悬浮液在

10.14028/j.cnki.1003-3726.2019.04.008

收稿:2018-10-30;修回:2019-01-29;

基金项目:国家自然科学基金(51476150),山西省留学科技资助项目(2017-088),中北大学杰出青年基金;

作者简介:刘宇翔(1993~),男,硕士,从事基于耗散粒子动力学方法的高分子复杂运动特性的研究工作;

\* 通讯联系人:刘汉涛(1975~),男,教授,从事能源转化和利用中微流体/纳米流体、多相流数值方法的研究工作。

E-mail:lht@nuc.edu.cn.

微通道壁面间的流动机理,实现在热-流耦合作用下对生物微型器件内生物大分子(药物或 DNA)的精确控制与输送,在医学和工程应用中具有重要的意义,并为研究热与高分子耦合的复杂动力学问题提供一种新的途径。

## 1 eDPD 方法

### 1.1 控制方程

eDPD 方法中每个粒子代表一组真实的流体分子。粒子运动都遵循质量、动量和能量守恒条件,采用 Boussinesq 假设近似流体浮升力随温度的变化关系,控制方程<sup>[12,21]</sup>如下:

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_i \quad (1)$$

$$\frac{d\vec{v}_i}{dt} = (\vec{f}_{ij}^C + \vec{f}_{ij}^D + \vec{f}_{ij}^R) + \vec{g}\beta(T - T_0) \quad (2)$$

$$C_v \frac{dT_i}{dt} = (q_{ij}^{visc} + q_{ij}^{cond} + q_{ij}^R) \quad (3)$$

式中, $\beta$ 为热膨胀系数, $\vec{g}$ 为重力矢量, $T$ 为粒子温度, $T_0$ 为初始温度, $q_{ij}^{cond}$ 、 $q_{ij}^{visc}$ 和 $q_{ij}^R$ 分别为碰撞热流、粘性热流和随机热流。保守力 $\vec{f}_{ij}^C$ 、耗散力 $\vec{f}_{ij}^D$ 和随机力 $\vec{f}_{ij}^R$ 的表达式为:

$$\vec{f}_{ij}^C = \sum_{j \neq i} a_{ij} \omega(r_{ij}) \vec{e}_{ij} \quad (4)$$

$$\vec{f}_{ij}^D = \sum_{j \neq i} -\gamma_{ij} \omega^D(r_{ij}) (\vec{e}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij}) \vec{e}_{ij} \quad (5)$$

$$\vec{f}_{ij}^R = \sum_{j \neq i} \sigma_{ij} \omega^R(r_{ij}) \zeta_{ij} \Delta t^{-1/2} \vec{e}_{ij} \quad (6)$$

式中, $r_{ij} = r_i - r_j$ , $v_{ij} = v_i - v_j$ , $e_{ij}$ 是粒子 $j$ 到粒子 $i$ 的单位向量。保守力 $\vec{f}_{ij}^C$ 是一种沿粒子-粒子中心的软作用力, $a_{ij}$ 为保守力系数,该参数影响粒子间相互作用力大小并且控制 eDPD 系统的状态方程和可压缩性方程, $\omega^C$ 为保守力权函数。式(5)耗散力 $\vec{f}_{ij}^D$ 负号表明,耗散力减弱粒子间相互作用,其直接结果是减少系统动能,降低系统温度, $\gamma_{ij}$ 为耗散力系数, $\omega^D$ 为耗散力权函数。而随机力 $\vec{f}_{ij}^R$ 引起粒子间的随机振动,增加系统的动能,提高系统的温度, $\sigma_{ij}$ 为随机力系数, $\omega^R$ 为随机力权函数, $\zeta_{ij}$ 为具有零均值和单位方差的随机数,其 $\zeta_{ij} = \zeta_{ji}$ 的性质保证了 eDPD 系统总能量守恒。

$\omega$ 为权函数,随粒子间距离的增大而单调递减,粒子间距超出截断半径时权函数的值变为0。本文采用 Lucy 软排斥函数作为保守力权函数<sup>[22]</sup>:

$$\omega^C(r_{ij}) = \begin{cases} \frac{5}{\pi} \left(1 + 3 \frac{r_{ij}}{r_c}\right) \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right)^3 & (r_{ij} < r_c) \\ 0 & (r_{ij} \geq r_c) \end{cases} \quad (7)$$

Fan 等<sup>[2]</sup>提出广义权函数并应用在耗散力和随机力中,以提高 eDPD 系统的施密特数,使系统具有更好的动态特性,且不受系统维度的限制,其函数如下:

$$\omega^D(r_{ij}) = (\omega^R(r_{ij}))^2 = \begin{cases} \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right)^s & (r_{ij} < r_c) \\ 0 & (r_{ij} \geq r_c) \end{cases} \quad (8)$$

式中, $r_c(\geq 1)$ 和 $s(\leq 2)$ 分别是截断半径和指数,Fan<sup>[2]</sup>、Liu<sup>[23]</sup>等系统地研究了 $s$ 和 $r_c$ 对扩散系数、粘度和施密特数的影响。增加截断半径 $r_c$ 将极大地增强粒子间作用力,但交互粒子对数和计算

量大幅提高,因此选用截断半径  $r_c$  为 1。当  $r/r_c = 1$  且  $s \geq 1$  时,广义权函数出现不连续性,当  $r/r_c$  较大时,广义权函数随着  $s$  的减小急剧增加,为保证  $r/r_c = 1$  附近的作用力变化幅度适中,指数  $s$  的值取为  $1/2$ 。

碰撞热流  $q_{ij}^{cond}$ 、粘性热流  $q_{ij}^{visc}$  和随机热流  $q_{ij}^R$  统称热通量向量<sup>[21,24]</sup>,其计算表达式如下:

$$q_{ij}^{cond} = \sum_{j \neq i} \kappa_{ij} \omega^2(r_{ij}) \left( \frac{1}{T_i} - \frac{1}{T_j} \right) \quad (9)$$

$$q_{ij}^{visc} = \sum_{j \neq i} \frac{1}{2C_v} \left( \omega^D(r_{ij}) \left[ \gamma_{ij} (\vec{e}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij})^2 - \frac{\sigma_{ij}^2}{m} \right] - \sigma_{ij} \omega^R(r_{ij}) (\vec{e}_{ij} \cdot \vec{v}_{ij}) \zeta_{ij} \right) \quad (10)$$

$$q_{ij}^R = \sum_{j \neq i} \alpha_{ij} \omega^R(r_{ij}) \Delta t^{-1/2} \zeta_{ij}^e \quad (11)$$

式中,  $\kappa_{ij}$  为碰撞热流系数,  $T_i$  和  $T_j$  分别为粒子  $i$  和  $j$  粒子的温度,  $m$  为 eDPD 粒子质量,  $\alpha_{ij}$  为随机热流系数,  $\zeta_{ij}^e$  为具有零均值和单位方差的非对称随机数。由耗散-涨落定理<sup>[21]</sup>可得耗散力系数  $\gamma_{ij}$  与随机力系数  $\sigma_{ij}$  的关系:

$$\gamma_{ij} = \frac{\sigma^2(T_i + T_j)}{4k_B T_i T_j} \quad (12)$$

$$\alpha_{ij} = \sqrt{2k_B \kappa_{ij}} \quad (13)$$

式中,  $k_B$  为玻尔兹曼常数。导热热流系数  $\kappa_{ij}$  表达式为:

$$\kappa_{ij} = \frac{C_v^2 k_o (T_i + T_j)^2}{4k_B} \quad (14)$$

式中,  $k_o$  为介观传热系数,其值与 eDPD 粒子间的热摩擦相关,最终决定 eDPD 系统的热传导率, Abu-Nada 等<sup>[15]</sup>通过 FD 与 eDPD 的对比研究,确定  $k_o$  的值为  $1.26 \times 10^{-4}$ 。  $C_v$  是 eDPD 粒子在恒定体积下的热容量,通过玻尔兹曼常数标准化得到无量纲数,  $\overline{C_v} = C_v/k_B = 1 \times 10^5$ 。

采用 Groot 和 Warren 提出的改进 Velocity-Verlet 积分算法<sup>[25]</sup>,其中修正因子  $\lambda$  的推荐值为 0.65,随机力系数  $\sigma$  的推荐值为 3。计算区域内的 eDPD 粒子以面心立方(FCC)晶格分布,为使晶格周期为 1,设定密度  $\rho$  为 4。时间步长设定为  $\Delta t = 0.001$ ,可以更精确的得到微通道内高分子悬浮液温度梯度变化及其影响。

### 1.2 FENF 高分子链模型

采用有限拉伸非线性弹性(FENE)珠-簧链模型<sup>[26]</sup>模拟生物大分子,标准 eDPD 粒子表示高分子链珠粒,相邻珠粒间的弹簧模型由弹簧力实现,其表达式为:

$$F_{ij}^S = \frac{H r_{ij}}{1 - (r_{ij}/r_{max})^2} \quad (15)$$

式中,  $H$  为弹簧常数,  $r_{max}$  为相邻两粒子间的最大距离,当两个粒子间的距离达到这个最大距离时,弹簧力就会增加至无穷大,因此相邻两粒子间的距离不会超过  $r_{max}$ 。

## 2 eDPD 数值方法测试算例

本节通过对等温高分子悬浮液的 Poiseuille 流动和强制对流换热两个算例进行模拟,并与已有的经典结论进行比较,来验证 eDPD 方法处理等温高分子悬浮液流动和热对流问题的准确性和可靠性,为后续研究微通道间温度梯度作用下的高分子悬浮液流动做准备。

模拟算例的控制方程中,各物理量均为无量纲量。根据 Groot 和 Warren<sup>[25]</sup>的研究,壁面粒子  $w$ 、流体粒子  $s$  和高分子链粒子  $p$  间的保守力系数分别为  $a_{ww} = 5, a_{ss} = a_{pp} = a_{ps} = 75k_B T/\rho = 18.75, a_{ws} = a_{wp} = (a_{ss} \times a_{ww})^{1/2} = 9.68$ ;温度  $k_B T = 1$ ,每个粒子的质量  $m = 1$ 。在  $x$  和  $y$  方向施加周期性边界,在  $z$  方向施加麦克斯韦反射(Maxwellian reflection)边界条件<sup>[27]</sup>。

## 2.1 等温高分子悬浮液流动模拟

第一个验证算例是微直通道内等温高分子悬浮液流动模拟,模拟条件与文献[8]中的相同。模拟流动区域范围:  $-30 \leq x \leq 30$ ,  $-1.5 \leq y \leq 1.5$ ,  $-15 \leq z \leq 15$ , 均匀布置 21600 个流体粒子和 2160 个边界粒子。 $x$  方向施加无量纲驱动力 0.02, 实现压力梯度驱动流体粒子运动。FENE 模型中, 弹簧常数  $H = 6.0$ , 相邻两珠最大距离  $r_{\max} = 3.0$ 。设定高分子长度 (ChainLen) 分别为 30、60、90, 高分子数量 (nChain) 分别为 30、60、90, 并将高分子随机分布在流体区域内。在处理计算结果时, 将计算区域  $z$ - $x$  平面划分为  $300 \times 20$  个格子, 每计算  $2 \times 10^4$  个时间步长 (即 400 个时间单位) 将每格内所有粒子的流动参数取均值, 得到局部位置各参数的变化情况及整体的流动特性。

图 1 表示高分子悬浮液在微直通道 (垂直通道方向  $x=0$  处截面) 内流动速度分布与文献[8]的对比。从图中可以看出, 在条件相同情况下, 速度分布曲线与文献[8]一致, 说明 eDPD 方法可以准确模拟等温条件下高分子悬浮液在微通道内的流动特性。

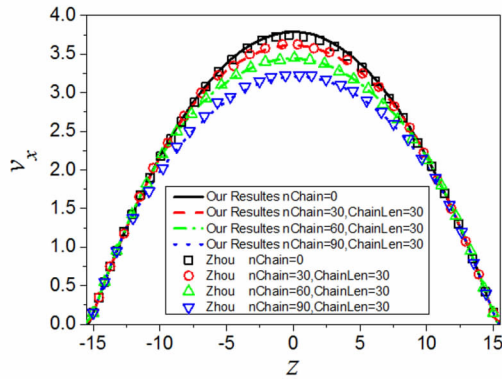


图 1 本文方法与文献模拟微通道内高分子悬浮液流动速度分布对比  
(高分子链长度为 30, 高分子链数分别为 0、30、60、90)

Figure 1 Comparison of the velocity profiles across the micro-channel with macromolecule  
(ChainLen=30, nChain=0,30,60,90)

## 2.2 圆柱绕流模拟

第二个验证算例是在强制对流情况下二维平板中围绕圆柱流动模拟。模拟流动区域范围:  $-100 \leq x \leq 100$ ,  $-1.5 \leq y \leq 1.5$ ,  $-30 \leq z \leq 30$ , 圆柱体直径为 10。通道内均匀分布 152400 个流体粒子,  $z$  方向布置 7200 个边界粒子, 圆柱区域由 936 个固壁粒子构成。圆柱绕流雷诺数:

$$\text{Re} = v_x D / \nu \quad (16)$$

式中,  $D$  为圆柱直径, 值为 10;  $\nu$  为流体运动粘度, 值为 0.25,  $v_x$  为流体的运动速度, 对流体施加流速 0.5, 由式(16)得雷诺数  $\text{Re}$  为 20。应用 eDPD 方法计算雷诺数为 20 时圆柱体表面的努塞尔数 ( $\text{Nu}$ ) 分布, 其曲线如图 2 所示。从图中可以看出, 在条件相同的情况下 eDPD 模拟结果与文献 Gan、Chang<sup>[28]</sup> 的直接数值模拟结果以及 Chang、Finlayson<sup>[29]</sup> 的有限元计算结果一致, 说明本文 eDPD 方法能准确地处理强制对流换热问题。

## 3 微通道内温度梯度作用下高分子悬浮液流动的模拟

采用前述建立的 eDPD 方法, 对微通道内温度梯度作用下高分子悬浮液流动进行模拟, 探究微通道内温度梯度对高分子悬浮液运动特性的影响。流体初始温度为  $T_f = 1.0$ , 上壁面为高温区域  $T_H$ , 下壁面为低温区域  $T_C$ , 两壁面简化为恒温热源, 设定模拟过程中壁面维持初始温度不变。流动区域  $x$  (沿通道方向)、 $y$  (垂直平面方向) 和  $z$  (垂直通道方向) 分别为  $-30 \leq x \leq 30$ ,  $-1.5 \leq y \leq 1.5$ ,  $-15 \leq z \leq$

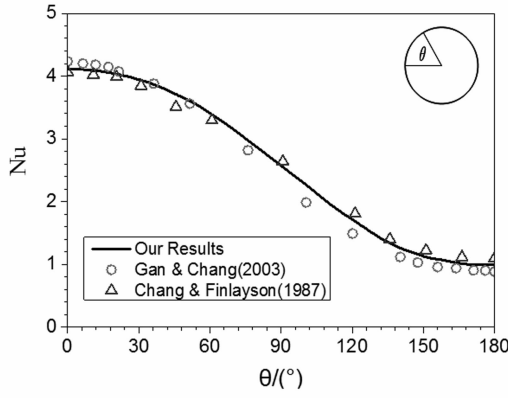


图 2 圆柱体表面的努塞尔数(Nu)分布, Re=20

Figure 2 The local Nusselt number distributing along the cylinder surface (Re=20) when the fluid flows around circular cylinder

15. 在通道内随机布置 30 条长度分别为 30、60、90 的高分子, 高温  $T_H$  分别为 1.4、1.2、1.1, 低温  $T_C$  分别为 0.6、0.8、0.9。其余 eDPD 计算参数如第 2 节所述。

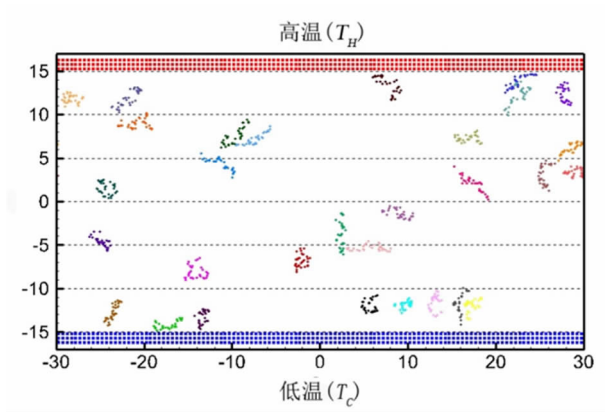


图 3 计算模型

Figure 3 Calculation model diagram

### 3.1 微通道内高分子悬浮液的温度分布

探究温度梯度对微通道内高分子悬浮液的热传导及温度分布的影响, 引入无量纲温度  $T_w$  和无量纲长度  $Z_w$ , 分别为:

$$T_w = \frac{T - T_C}{T_H - T_C} \tag{17}$$

$$Z_w = \frac{z}{h} \tag{18}$$

式中,  $h$  为微通道宽度。

图 4 展示了微通道内处于平衡温度条件之前过渡期内发生的瞬态过程, 可知无论是瞬态过程还是稳态过程, 温度梯度对沿垂直通道方向的无量纲温度分布影响不大。当达到稳态时, 温度分布呈线性分布。由于温度和传热在瞬态过程中是变化的, 因此下文对速度、高分子质心分布及拉伸特性的探究都是在稳态过程中进行的。

在壁面温度为  $T_C=0.6, T_H=1.4$  时,  $t=0.0012$  和  $0.036$  时刻的温度云图, 如图 5 所示。图 5(a) 表明在  $t=0.0012$  时刻靠近壁面的悬浮液温度与壁面温度一致, 而在通道中部的悬浮液保持其初始温度,

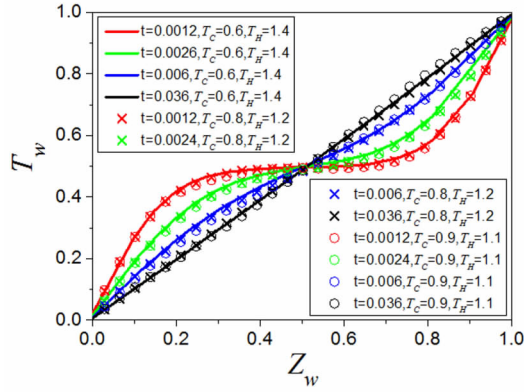


图 4 垂直通道方向的温度分布随时间变化情况

Figure 4 Dimensionless temperature distribution along the vertical channel at different time

完全不受壁面温度的影响,并且此时高分子的拉伸、折叠、缠绕等行为均未发生明显变化。在  $t=0.036$  时刻达到稳态,悬浮液的温度分布如图 5 (b)所示,下文将在此情况下将进行研究。图 5 (b)还可以看出,高分子的拉伸程度显著增加,高温区域的拉伸程度要比低温区域大得多,3.4 节将详细探究。

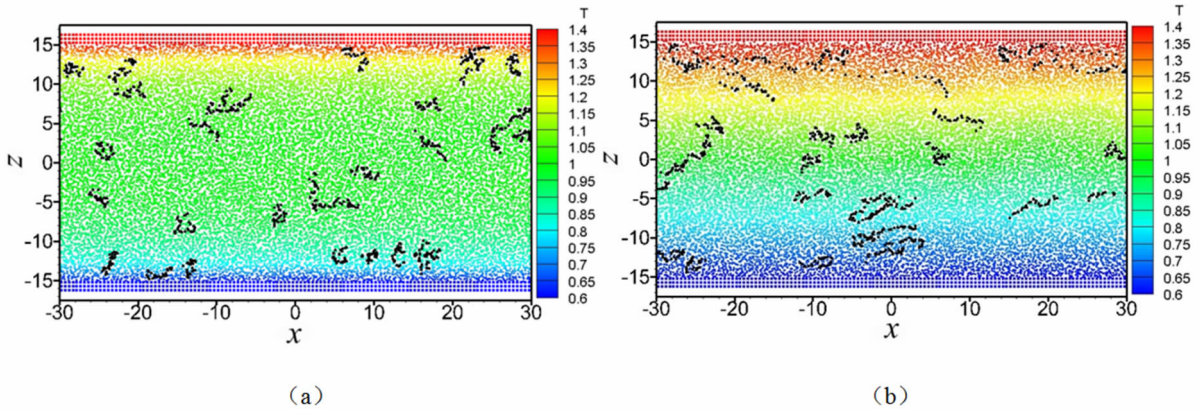


图 5 两壁面温度为  $T_c=0.6, T_h=1.4$  的温度云图(黑色实心圆表示高分子粒子)

(a) $t=0.0012$ ; (b) $t=0.036$

Figure 5 Snaps of temperature cloud while  $T_c=0.6$  and  $T_h=1.4$  (black solid circles represent macromolecule particles)

(a) $t=0.0012$ ; (b) $t=0.036$

### 3.2 微通道内高分子悬浮液的速度分布

探究温度梯度对高分子悬浮液流动速度的影响,为微通道内悬浮液局部和整体速度的精确控制提供理论基础。图 6(a)表示高分子较短( $n_{Chain}=30, ChainLen=30$ )时悬浮液速度分布曲线,与传统的平面泊肃液流不同,其中心线右侧速度大于左侧速度,速度峰值出现在中心线右侧。随着温度梯度的增加,这种趋势越来越明显。由于悬浮液粘度随温度的升高而降低,所以随温度升高粒子间的粘滞力减小。因此,在微通道中上部高温区的速度大于下部低温区速度。随着温度梯度的减小,速度峰值增加,速度差减小,速度分布曲线的整体对称性变好。随着高分子长度的增加,悬浮液速度不随温度的升高而增加,如图 6(b)所示。原因可能是高分子较长时,高分子之间的缠绕、拉伸、牵拉起主导作用,阻碍了周围溶剂粒子的运动,使流动速度大幅度降低,降低温度梯度对速度的影响。

此外,在温度梯度作用下,产生沿垂直通道向上(指向高温壁面)的浮升力。进而在浮力升力作用下,高分子向上部区域迁移,对溶剂粒子产生阻力效应,降低流动速度。因此,速度分布曲线呈现出中心线左侧速度高于右侧,峰值速度出现在中心线左侧。

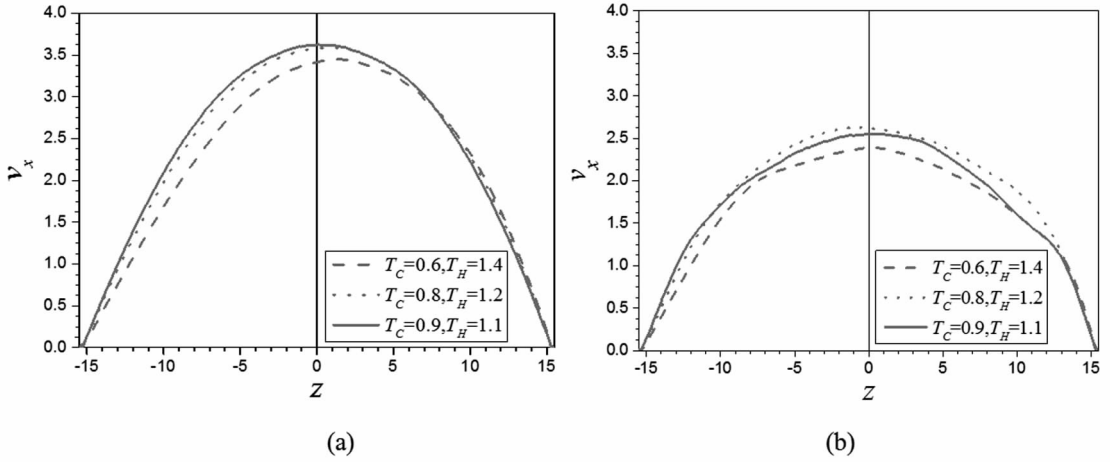


图 6 不同温度梯度下高分子悬浮液速度分布曲线

Figure 6 Velocity profiles across the micro-channel under different thermal gradients

(a) nChain=30, ChainLen=30; (b) nChain=30, ChainLen=90

### 3.3 高分子的质心分布

通过探究质心分布来分析在温度梯度作用下高分子的迁移情况,为悬浮液中高分子的定向运输和筛选提供理论基础。将垂直通道方向均分为 100 层并统计高分子链质心出现在每层的次数,进而根据式 (19) 计算概率密度  $P$  :

$$P = \frac{N}{Step \times nChain} \tag{19}$$

式中,  $N$  为统计阶段每一层出现高分子链质心的次数,  $step$  为统计阶段的总步数,  $nChain$  为通道内高分子链的数量。

由图 7 可以看出,温度梯度对高分子分布影响明显。由于温度梯度引起垂直通道向上的浮升力,导致高分子沿垂直通道迁移。当温度梯度较大时,通道内浮升力较大,高分子在其作用下向通道上部迁移的幅度大,因此分布曲线整体向右侧偏移且倾斜程度较大。随着温度梯度减小,浮升力随之减小,高分子向通道上部偏移的幅度降低,分布曲线整体向中部偏移且倾斜程度变缓。当无温度梯度时通道内浮升力消失,分布曲线呈双峰状,通道中部出现局部极小值,这是由于布朗扩散运动与壁面诱导共同作用的结果。由于高分子与壁面间相互作用,使得高分子远离壁面,造成近壁面区域出现了高分子排空层,因此曲线在两侧快速下降。

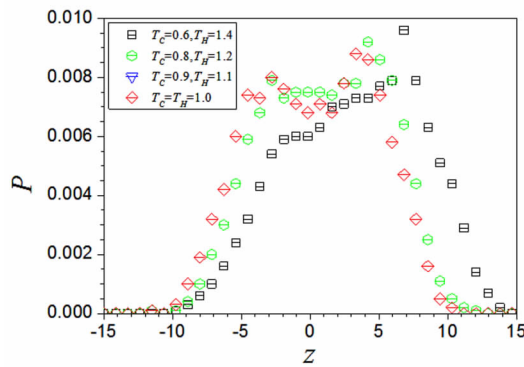


图 7 质心概率分布

Figure 7 Centroid probability distribution

### 3.4 高分子的拉伸特性

探究温度梯度对悬浮液中高分子拉伸程度的影响,为深入研究悬浮液的运动行为提供基础。为降低高分子之间作用的影响,在通道内随机布置 30 条长度为 30 珠粒的高分子。拉伸长度<sup>[30]</sup>是衡量高分子链拉伸程度的重要指标,可表示为:

$$\bar{X} = \max(r_{i,x}) - \min(r_{i,x}) \quad (20)$$

式中  $r_{i,x}$  为第  $i$  链上各珠粒位置向量在  $x$  方向的分量。将垂直通道方向分成 20 层统计每层中各条高分子链的拉伸长度并取均值,得到平均拉伸长度  $L_x$ 。

图 8 为不同温度梯度下高分子的平均拉伸长度,可得平均拉伸长度曲线具有两个局部峰值,表明通道中部高分子的拉伸程度低于通道顶部与低部的拉伸程度。当无温度梯度时,曲线呈完全对称,两峰值位置关于中轴线对称。随着温度梯度的增加,高分子整体拉伸程度增大,曲线整体向右侧偏移,右侧峰值比左侧峰值大。这是由于高温促进了高分子的拉伸与迁移,因此高温区域的拉伸程度比低温区域大。

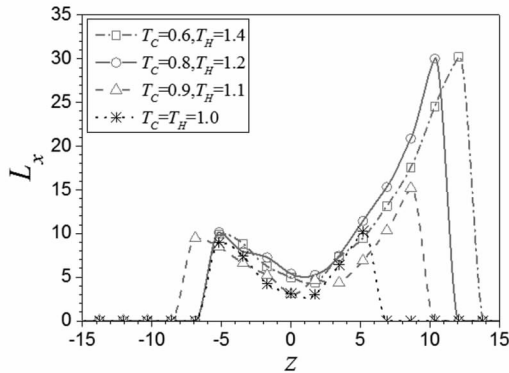


图 8 不同温度梯度下高分子的平均拉伸长度

Figure 8 Average stretching length of macromolecules at different temperature gradients

## 4 结论

本文将 eDPD 方法扩展到模拟热梯度作用下微直通通道中的高分子悬浮液流动,采用有限拉伸非线性弹性(FENE)珠-簧链模型建立高分子,对微通道内高分子及悬浮液运动规律进行了模拟,结果表明:

(1)无论是瞬态过程还是稳态过程,无量纲温度对垂直通道内的温度梯度都不敏感。在瞬态过程中时刻进行着传热和温度变化,当达到稳态时微通道内温度呈线性分布;

(2)当高分子长度较短时,由于温度对悬浮液粘度的影响,截面速度差随温度梯度的增加而增大。低温区域悬浮液流动速度随温度梯度的增大而明显降低。随着高分子长度的增加,高分子之间的缠绕、拉伸和拖拽现象突出,阻碍了周围溶剂粒子的运动,从而大大降低了截面速度,降低了温度梯度对速度的影响;

(3)温度梯度对质心分布的影响很大,直接影响高分子迁移的程度。当温度梯度较大时,高分子向通道上部迁移程度大,分布曲线向右侧偏移,并有较大的倾斜度。随着温度梯度的减小,高分子向通道上部迁移的程度减小,分布曲线向中间偏移且倾斜度变缓。当两壁间没有温度梯度时,分布曲线呈双峰对称结构;

(4)温度梯度对高分子的拉伸程度有明显影响,高温促进高分子的拉伸。

## 参考文献:

- [1] Gooneie A, Schuschnigg S, Holzer C. *Polymers*, 2017, 9(1):16.
- [2] Fan X, Phanhtien N, Chen S, Wu X, Yong N T. *Phys Fluids*, 2006, 18(6):861~136.
- [3] Perkins T T, Smith D E, Larson R G, Chu S. *Science*, 1995, 268(5207):83~7.
- [4] Litvinov S, Hu X, Ellero M. *Microfluid Nanofluid*, 2014, 16(1-2):257~264.
- [5] Kleßinger U A, Wunderlich B K, Bausch A R. *Microfluid Nanofluid*, 2013, 15(4):533~540.

- [6] Millan J A, Jiang W, Laradji M, Wang Y. *J Chem Phys*, 2007, 126(12):124905.
- [7] 许少锋, 汪久根. *高分子学报*, 2015(3):346~355.
- [8] 周吕文, 刘谋斌, 常建忠. *高分子学报*, 2012(7):720~727.
- [9] Fan X, Phanthien N, Yong N T, Wu X, Xu D. *Phys Fluids*, 2003, 15(1):11~21.
- [10] Li Y, Abberton B C, Kroger M, Liu W. *Polymers*, 2013, 5(2):751~832.
- [11] Zhao J, Lu L, Zhang Z, Guo W, Rabczuk T. *Comp Mater Sci*, 2015, 96:432~438.
- [12] Español P. *Europhys Lett*, 1997, 40(2):141
- [13] Toru Y, Anurag K, Yutaka A, Gregory O, Mohammad F. *Numer Heat Tr A-Appl*, 2011, 60(8):651~665.
- [14] Abu-Nada E. *Int Commun Heat Mass*, 2015, 69:84~93.
- [15] Qiao R, He P. *Mol Simulat*, 2007, 33(8):677~683.
- [16] Zhang Y, Luo X, Yi H, Tan H. *Int J Heat Mass Tran*, 2016, 97:279~288.
- [17] Larentzos J P, Brennan J K, Moore J D, Lisal M, Mattson W D. *Comput Phys Commun*, 2014, 185(7):1987~1998.
- [18] Moore J D, Barnes B C, Izvekov S, Lisal M, Sellers M S, Taylor D E, Brennan J K. *J Chem Phys*, 2016, 144(10):155.
- [19] Johansson E O, Yamada T, Sundén B, Yuan J. *Int J Therm Sci*, 2016, 101:207~216.
- [20] Li Z, Tang Y, Li X, Karniadakis G E. *Chem Commun*, 2015, 51(55):11038~11040.
- [21] Ripoll M, Español P, Ernst M. *Int J Mod Phys C*, 1998, 9(08): 1329~1338.
- [22] Abu-Nada E. *J Heat Trans-Tasem*, 2011, 133(11):112502.
- [23] Liu H, Jiang S, Chen Z, Liu M, Chang J, Wang Y, Tong Z. *Microfluid Nanofluid*, 2015, 18(5-6):1309~1315.
- [24] He P, Qiao R. *J Appl Phys*, 2008, 103(9):219~543.
- [25] Groot R D, Warren P B. *J Chem Phys*, 1998, 107(11):4423~4435.
- [26] Ulianova V, Zazerin A, Pashkevich G, Bogdan O, Orlov A. *Sensor Actuat A-Phys*, 2015, 234:113~119.
- [27] Yang T H, Kwon H J, Lee S S, An J, Koo J H, Kim S Y, Kwon D S. *Sensor Actuat A-Phys*, 2010, 163(1):180~190.
- [28] Chang M W, Finlayson B A. *Numer Heat Tr A-Appl*, 1987, 12(2):179~195.
- [29] Gan H, Chang J, Feng J J, Hu H H. *J Fluid Mech*, 2003, 481(481): 385~411.
- [30] Jendreck R M, Schwartz D C, Graham M D, Depablo J J. *J Chem Phys*, 2003, 119(2):1165~1173.

## Energy-conserving Dissipative Particle Dynamics Simulation of Macromolecular Solutions Flow in Micro-Channel under Temperature Gradient

LIU Han-tao\*, LIU Yu-xiang

*(The Laboratory of Energy&Environment Engineering and Computational Fluid Dynamics, North University of China, Taiyuan 030051, China)*

**Abstract:** Macromolecule migration subjected to thermal gradient exists widely in biological and medical engineering problems. Exploring the thermo-hydrodynamic mechanism is of great significance both for biochemical engineering and micro/nanotechnology. In this paper, the energy-conserving dissipative particle dynamics (eDPD) is extended to investigate the flow of macromolecular solutions and macromolecule behaviors in a micro-channel subjected to thermal gradient. The accuracy and reliability of the codes are verified by comparative studies. Then, the velocity of macromolecular solutions under different temperature gradients and lengths, as well as their coupling effects are comparatively analyzed, and the macromolecular centroids distribution and behaviors including stretching, winding and folding are investigated systemically. The results show the macromolecular solution flow, probability distribution of centroids and the behaviors of macromolecules are obviously affected by thermal gradient, and some new features are revealed. The theoretical basis provides a potential way for the precise control of macromolecules (ex. drugs or DNA), and a new approach is proposed to investigate the complex dynamic behaviors of macromolecule under thermal condition.

**Key words:** Energy-conserving dissipative particle dynamics (eDPD); Macromolecule; Microflow; Temperature gradient; Finite-extensive nonlinear elastic(FENE) model