

# FVM-MD 耦合算法在碳纳米管绕流中的应用

周文静 栾辉宝 孙杰 何雅玲 陶文铨

(西安交通大学能源与动力工程学院, 教育部热流科学与工程重点实验室, 陕西 西安 710049)

**摘要** 本文采用有限容积法 (FVM)-分子动力学 (MD) 耦合算法, 模拟研究了碳纳米管绕流现象。在液体流动方向和垂直于流动的方向同时用非周期性边界条件处理, 相比于传统的周期性边界条件, 更准确地描述了液体流动。耦合方法与纯 MD 方法进行比较的结果显示耦合方法不但可以节省计算时间, 而且在保证精确刻画局部微观细节的前提下, 能更加准确地描述流体的速度场。

**关键词** 分子动力学; 有限容积法; 多尺度耦合; 非周期性边界

**中图分类号:** TK123 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-231X(2011)04-0679-04

## Application of FVM-MD Coupling Algorithm for Flow Around Carbon Nanotube

ZHOU Wen-Jing LUAN Hui-Bao SUN Jie HE Ya-Ling TAO Wen-Quan

(Key Laboratory of Thermal Fluid Science and Engineering of MOE, School of Energy & Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

**Abstract** In this paper, the coupled FVM (finite volume method)-MD (molecular dynamics) algorithm was used to investigate the flow around a carbon nanotube (CNT). The non-periodic boundary condition (NPBC) was applied in both the directions along and perpendicular to the fluid flow, which could describe the flow details better compared with the traditional periodic boundary condition. The results show that the coupled algorithm can not only save computational time, but also provide better microscopic characteristics.

**Key words** molecular dynamics; finite volume method; multiscale simulation; non-periodic boundary

## 0 引言

随着纳米技术的发展, 微纳米尺度问题越来越受关注。传统的基于连续介质的宏观方法对于描述微纳米尺度问题显得力不从心; MD 方法虽然能够从微观角度解决这一问题, 但巨大的计算量限制了其应用范围; 多尺度耦合方法应运而生<sup>[1~10]</sup>, 很好地解决了这一矛盾。近年来, 许多学者对 MD 与宏观方法进行耦合展开了研究。O'Connell 与 Thompson<sup>[1]</sup> 在 1995 年首次提出将 MD 方法与基于连续介质的宏观方法进行耦合来研究液体流动, 提出了基于状态参数约束的耦合方法。随后, Hadjiconstantinou 与 Patera<sup>[11]</sup> 提出了另外一种基于 Schwarz 交替方法的耦合算法, 该算法实现了时间上的解耦。但之前的耦合方法都只能处理 MD 区的周期性边界, 直到 Werder 等<sup>[12]</sup> 提出了可处理流动方向的非周期性边界的耦合模型, 并用基于 Schwarz 交替方法的耦合算法研究碳纳米管绕流现象, 研究了流动方向速度

的耦合情况。之后 Kotsalis 等<sup>[13]</sup> 对 Werder 等<sup>[12]</sup> 提出的模型采用反馈机制作了修正, 粒子区边界附近的粒子所受作用力随着局部密度进行调整。这一模型使得密度振荡情况得到改善, 但反馈调节的副作用尚不清楚。Kalweit 与 Drikakis<sup>[14]</sup> 研究了耦合算法中粒子区的密度分布行为, 并用数值方法确定了粒子区 Lennard-Jones(L-J) 气体、液体和超临界流体的密度分布和边界附近缓冲层的厚度, 与理论模型符合良好。为了处理好非周期性边界条件, Huang 等<sup>[15]</sup> 采用一种软约束机制来修正边界附近的流体状态参数, 模拟结果表明该约束机制能将边界附近的振荡控制在一定范围, 甚至在有内部扰动的情況下也表现出稳定的性质。本文在 Werder 等的研究基础上用基于状态参数的约束耦合方法模拟了碳纳米管绕流现象, 并研究了垂直于流动方向的速度情况, 结果显示耦合方法与单一方法很好地符合。

收稿日期: 2011-01-15; 修订日期: 2011-03-16

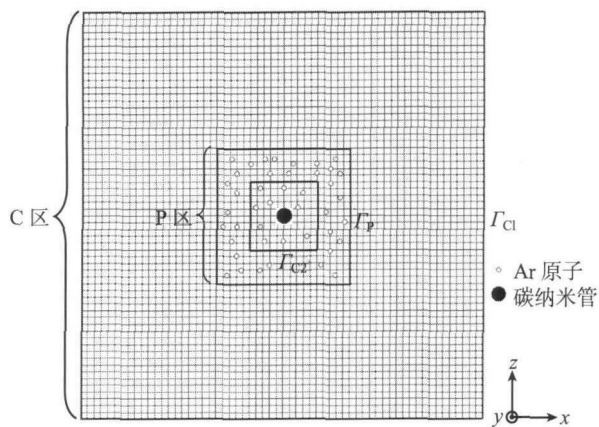
基金项目: 国家自然科学基金重点项目 (No.50636050); 国家 863 项目 (No.2009AA01A131)

作者简介: 周文静 (1984-), 男, 江西上饶人, 博士研究生, 主要从事传热与流动问题的多尺度数值模拟。

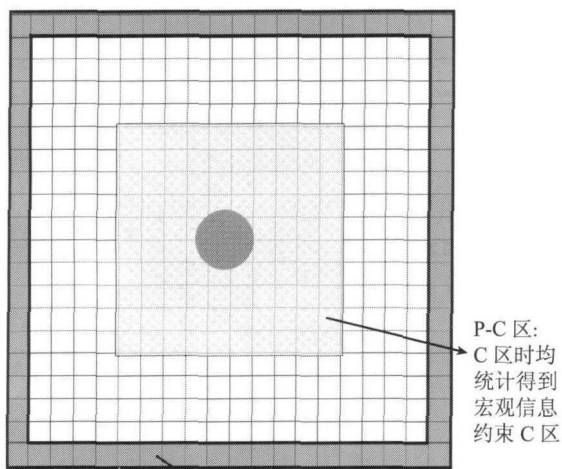
# 1 FVM 与 MD 耦合模型

## 1.1 粒子区 (P 区)

如图 1 所示, 计算区域分为粒子区, 连续介质区和重叠区 3 部分。



(a) 不同算法实施区域示意图



C-P 区: C 区通过施加约束力调整 P 区粒子速度

(b) P 区放大图

图 1 FVM-MD 耦合方法示意图

Fig. 1 Couple structure between FVM and MD

粒子区采用 3 维 MD 方法进行模拟, 粒子的位置和速度根据牛顿运动方程演化:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{r}_i = \mathbf{u}_i \quad (1)$$

$$m_i \frac{d}{dt} \mathbf{u}_i = \mathbf{F}_i = - \sum_{j \neq i} \nabla U(r_{ij}) \quad (2)$$

本文研究液态氩 (Ar) 流经 (16, 0) 碳纳米管 (C), 液体流动方向沿  $x$  轴正向。碳纳米管半径  $r = 0.626$  nm, 垂直于来流方向放置 (即平行于图 1 中的  $y$  轴)。氩原子间相互作用势能如下:

$$U(r_{ij}) = 4\varepsilon_{\text{Ar}} \left[ \left( \frac{\sigma_{\text{Ar}}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma_{\text{Ar}}}{r_{ij}} \right)^6 \right] + U_e(r_w; \rho, T) \quad (3)$$

其中, 右边第一项为 Lennard-Jones (L-J) 双体势能模型, 第二项为考虑在边界附近的 Ar 原子与周围环境作用的势能项, 该项大小决定于 Ar 原子距离边界的距离  $r_w$ , 局部密度以及局部温度  $T$ 。Ar 的 L-J 参数为  $\varepsilon_{\text{Ar}} = 0.996$  kJ·mol<sup>-1</sup>,  $\sigma_{\text{Ar}} = 0.340$  nm。Ar 原子与 C 原子之间的势能函数同式 (3), 但没有  $U_e(r_w; \rho, T)$  项; 其中  $\varepsilon_{\text{ArC}} = 0.570$  kJ·mol<sup>-1</sup>,  $\sigma_{\text{ArC}} = 0.340$  nm。所有的势能函数截断半径为 1.0 nm。方程 (1) 和方程 (2) 通过蛙跳格式求解, 时间步长  $\delta t$  为 10 fs。

## 1.2 连续介质区 (C 区)

连续介质区采用 Navier-Stokes 方程描述二维稳态常物性不可压缩流动, 压力与速度耦合关系处理采用 SIMPLE 算法 [16]:

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (4)$$

$$\rho(\mathbf{u} \cdot \nabla) \mathbf{u} = -\nabla p + \mu \Delta \mathbf{u} \quad (5)$$

如图 1 所示, 连续区  $z$  方向上下边界为周期性边界条件, 左右边界都为第一类边界条件, 且在边界上有  $u_x = 100$  m·s<sup>-1</sup>,  $u_z = 0$  m·s<sup>-1</sup>。

## 1.3 重叠区 (O 区)

如图 1 所示, 本文在重叠区采用文献 [17] 中的数据交换方式, 即用 FVM 方法求解整个计算区域 (包括 P 区),  $\Gamma_{C1}$  为其外边界,  $\Gamma_{C2}$  所包含区域 (即图中 P-C 区) 中的节点信息由 P 区通过 MD 方法时均统计得到, 并以此作为 C 区的约束条件:

$$u_k^{P-C}(t) = \left\langle \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{N_k} u_i \right\rangle_{m\delta t} \quad (6)$$

其中,  $\langle \rangle_{m\delta t}$  表示在  $m\delta t$  的时长中进行时均统计, 模拟中取  $m = 500$ 。而 C 区向 P 区传递信息是通过给位于 P 区最外面一圈网格 (即图 1(b) 中的 C-P 区) 中的粒子施加约束力来实现的, 本文采用文献 [5] 中的耦合公式来实施此约束:

$$\ddot{\mathbf{x}}_i^k = \frac{1}{m\delta t} \left[ u_k^{C-P}(t) - \left\langle \frac{1}{N_k} \sum_{i=1}^{N_k} \dot{\mathbf{x}}_i \right\rangle_{m\delta t} \right] \quad (7)$$

其中,  $u_k^{C-P}(t)$  是  $t$  时刻 C-P 区网格  $k$  中心位置处由 FVM 方法得到的宏观速度。程序运行过程中当 MD 区基本到达平衡后开始进行两个区域的信息交换:

(1) 在 P-C 区中由 MD 在  $m\delta t$  时长中进行时均统计得每个节点的  $\mathbf{u}_k^{\text{P-C}}(t)$ , 并传递给 C 区作为边界信息, C 区以此为约束条件进行求解。

(2) C 区完成求解后得到 C-P 区各网格中心的宏观速度, 并立即传回 P 区, P 区根据公式 (7) 对粒子进行约束调整, 使其宏观统计量不断趋近  $\mathbf{u}_k^{\text{C-P}}(t)$ 。

上述 (1)、(2) 两个过程反复进行, 直至收敛。

为了将粒子控制在一定范围而不逃逸出 P 区, 就需要对 P 区边界附近的粒子施加一定的约束力, 本文采用 Werder 等<sup>[12]</sup>提出的方法, 考虑边界附近粒子与周围环境的作用, 即公式 (3) 中的  $U_e(r_w; \rho, T)$ 。对于单原子液体, 原子与周围环境的作用力和作用势能可由径向分布函数  $g(r)$  积分而得:

$$F_e(r_w) = -2\pi\rho \int_{z=r_w}^{r_c} \int_{x=0}^{\sqrt{r_c^2-z^2}} g(r) \frac{\partial U_{12-6}(r)}{\partial r} \frac{z}{r} x dx dz \quad (8)$$

$$U_e(r_w) = -2\pi\rho \int_{z=r_w}^{r_c} \int_{x=0}^{\sqrt{r_c^2-z^2}} g(r) U_{12-6}(r) x dx dz \quad (9)$$

以上两式中  $\rho$  为平均数密度,  $r_c$  为截断半径,  $r_w$  为原子到边界的距离。由于本文模拟工况与文献<sup>[12]</sup>中完全一样, 因此直接取该文献附录 A 中的拟合数据。

尽管对边界附近的原子施加了约束力, 在模拟的过程中原子还是会逃逸出计算区域。由于沿  $x$  方向 P 区的左右边界并非周期性, 为了尽可能真实地模拟非周期性边界条件, Werder 等<sup>[12]</sup>提出了一种模型用于处理这一问题。在该模型中, P 区左右边界在每个时间步中随该边界所在处的宏观速度移动, 在边界移动过程中有一部分原子与边界碰撞并且反弹, 在每个时间步的终了时刻, 左右边界被重置到初始位置, 因此在原子与边界碰撞后有若干原子逃离计算区域, 这部分在区域外的原子则用 USHER 算法<sup>[18]</sup>插入到左边界附近。在边界移动过程中, 通过计算碰撞时间来判断原子是否与边界碰撞, 碰撞时间为:

$$t_c = (x^n - \tilde{x}_w) / (u_w - \tilde{u}_x^{n+1/2}) \quad (10)$$

其中,  $x^n$  为碰撞前原子位置,  $\tilde{x}_w$  为边界初始位置,  $u_w$  为边界速度,  $\tilde{u}_x^{n+1/2}$  为原子在每一时间步长中速度更新后但在可能的碰撞前的速度。如果  $0 \leq t_c \leq \delta t$ , 则认为原子与边界碰撞, 碰撞后原子得到新的速度和位置:

$$u_x^{n+1/2} = -(\tilde{u}_x^{n+1/2} - u_w) + u_w \quad (11)$$

$$x^{n+1} = x^n + t_c \tilde{u}_x^{n+1/2} + (\delta t - t_c) u_x^{n+1/2} \quad (12)$$

当原子与 P 区左右边界作用时, 只有  $x$  方向的速度和位置变化,  $y$  和  $z$  方向保持不变。

本文在处理边界移动问题时不但考虑了液体流动方向, 而且在垂直于流动的方向也施加了这一模型, 即在 P 区的上下边界也考虑了边界的移动, 类似地上下边界附近的原子与边界作用后只有  $z$  方向的速度和位置发生变化,  $x$  和  $y$  方向的分量保持不变。在每次碰撞后, 逃逸出上下边界的原子也一并用 USHER 算法插入到 P 区的左边界附近。

## 2 结果及讨论

模拟中碳纳米管位于计算区域的中心, 并且平行于  $y$  轴放置。氩原子按 FCC (1 1 1) 排布, 密度为  $\rho = 1.008 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ 。在耦合算法中, MD 区尺寸为  $10 \text{ nm} \times 10 \text{ nm} \times 4.49 \text{ nm}$ , 氩原子总数为 6608; FVM 所覆盖的整个区域尺寸为  $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm} \times 4.49 \text{ nm}$ , 其网格为  $60 \times 60$ 。因此, 如图 1(b) 所示, 在传递信息过程中, P-C 区包含了  $10 \times 10 = 100$  个网格, C-P 区包含了 76 个网格。为了验证程序的准确性, 将耦合算法所得速度场分布与纯 MD 方法的结果进行对比。纯 MD 算法涉及整个计算区域, 即  $30 \text{ nm} \times 30 \text{ nm} \times 4.49 \text{ nm}$ , 氩原子总数为 63952。在耦合算法和纯 MD 算法中, 需要将流体温度控制在一定数值。为了不对主流方向结果造成影响, 则将 Berendsen 热浴<sup>[19]</sup>加于  $y$  方向, 取时间常数  $\tau_T = 0.1 \text{ ps}$ , 进而将流体温度控制在 215 K。

从以上的信息可知, 耦合方法中 MD 计算区域只有纯 MD 方法中的 1/9, 因此可以大大缩短计算时间。

图 2 是耦合方法与纯 MD 方法  $u$  和  $v$  速度等值线的对比图, 从图中可以看出耦合方法相对于单一方法的优势: 耦合方法不但可以精确刻画碳纳米管附近流体流动的细节, 而且在远离碳纳米管的区域也能得到更光滑更稳定的速度等值线。

在耦合方法中, 由于本文在 P 区的  $z$  方向边界上也作了非周期性处理 (即在每个时间步中上下边界也随其所在处的宏观速度移动), 能更准确地捕捉  $v$  速度的细节, 所以图 2(c) 中 P 区和 C 区的  $v$  速度衔接得较好; 由于计算区域中  $z$  方向速度相差不大, 致使图 2(d) 中的纯 MD 计算出的速度图波动比较明显; 这进一步体现了耦合方法的优势。

此外, 由于本文采用的是基于状态参数的耦合算法, 计算过程中 MD 方法和 FVM 方法在时间上

是同步进行的, 因此相比于基于 Schwarz 交替方法的耦合算法在求解非稳态问题上更有优势。

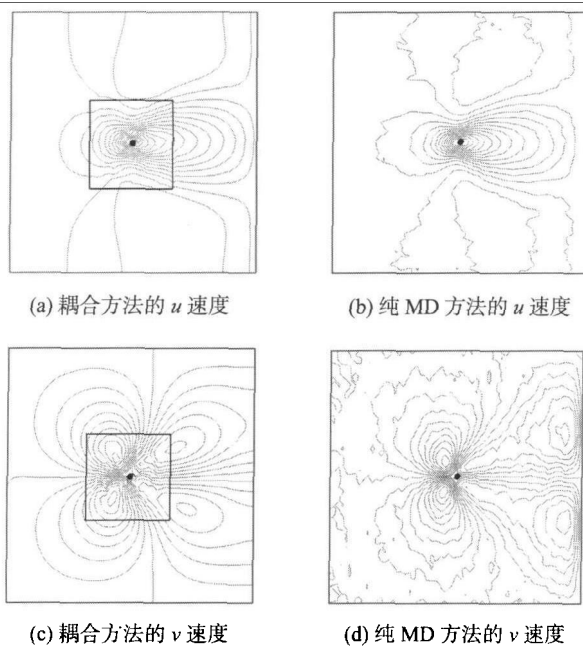


图 2 耦合方法与纯 MD 方法比较

Fig. 2 Comparisons of hybrid method and pure MD simulation

### 3 结 论

本文通过将 FVM-MD 耦合算法应用于碳纳米管绕流的研究, 得出以下结论:

(1) 从耦合算法与纯 MD 的比较结果中, 可以看出耦合算法在计算时间上具有很大优势, 而且耦合算法可以很好地刻画碳纳米管附近的微观细节, 在远离碳纳米管的区域也可以得到更好的结果。

(2) 本文将特殊的非周期边界处理方法应用到了 P 区的上下边界, 从而提高了  $z$  方向速度的计算精度。

(3) 本文采用的耦合算法中 MD 方法和 FVM 方法在时间上是同步进行的, 在求解非稳态问题上比基于 Schwarz 交替方法的耦合算法更有优势。

### 参 考 文 献

- [1] O'connell S T, Thompson P A. Molecular Dynamics-Continuum Hybrid Computations: A Tool for Studying Complex Fluid Flows [J]. Phys. Rev. E, 1995, 52(6): R5792-R5795
- [2] Flekkoy E G, Wagner G, Feder J. Hybrid Model for Combined Particle and Continuum Dynamics [J]. Europhys. Lett., 2000, 52: 271-276
- [3] Delgado-Buscalioni R, Convey P V. Continuum-Particle Hybrid Coupling for Mass, Momentum, and Energy Transfers in Unsteady Fluid Flow [J]. Phys. Rev. E, 2003, 67: 046704
- [4] Delgado-Buscalioni R, Flekkoy E G, Convey P V. Fluctuations and Continuity in Particle-Continuum Hybrid Simulations of Unsteady Flows Based on Flux-Exchange [J]. Europhys. Lett., 2005, 69: 959-965
- [5] Nie X B, Chen S Y, E W N, et al. A Continuum and Molecular Dynamics Hybrid Method for Micro- and Nano-Fluid Flow [J]. J. Fluid Mech., 2004, 500: 55-64
- [6] Nie X B, Chen S Y, Robbins M O. Hybrid Continuum-Atomistic Simulation of Singular Corner Flow [J]. Phys. Fluids, 2004, 16: 3579-3591
- [7] Ren W Q, E W N. Heterogeneous Multiscale Method for the Modeling of Complex Fluids and Micro-Fluidics [J]. J. Comput. Phys., 2005, 204(1): 1-26
- [8] LIU J, CHEN S Y, Nie X B, et al. A Continuum-Atomistic Simulation of Heat Transfer in Micro- and Nano-Flows [J]. J. Comput. Phys., 2007, 227: 279-291
- [9] Fedosov D A, Karniadakis G E. Triple-Decker: Interfacial Atomistic-Mesoscopic-Continuum Flow Regimes [J]. J. Comput. Phys., 2009, 228(4): 1157-1171
- [10] TAO W Q, HE Y L. Recent Advances in Multiscale Simulations of Heat Transfer and Fluid Flow Problems [J]. Progr. Comput. Fluid Dynam., 2009, 9(3-5): 150-157
- [11] Hadjiconstantinou N G, Patera A T. Heterogeneous Atomistic-Continuum Representations for Dense Fluid Systems [J]. Int. J. Mod. Phys., 1997, C 8(4): 967-976
- [12] Werder T, Walther J H, Koumoutsakos P. Hybrid Atomistic-Continuum Method for the Simulation of Dense Fluid Flows [J]. J. Comput. Phys., 2005, 205(1): 373-390
- [13] Kotsalis E M, Walther J H, Koumoutsakos P. Control of Density Fluctuations in Atomistic-Continuum Simulations of Dense Liquids [J]. Phys. Rev. E, 2007, 76: 016709
- [14] Kalweit M, Drikakis D. On the Behaviour of Fluidic Material at Molecular Dynamics Boundary Conditions Used in Hybrid Molecular-Continuum Simulations [J]. Mol. Simul., 2010, 36(9): 657-662
- [15] HUANG Z G, GUO Z N, YUE T M, et al. Non-Periodic Boundary Model with Soft Transition in Molecular Dynamics Simulation [J]. Europhys. Lett., 2010, 92: 50007
- [16] 陶文铨. 数值传热学 [M]. 第 2 版. 西安: 西安交大出版社, 2001
- [17] Dupuis A, Kotsalis E M, Koumoutsakos P. Coupling Lattice Boltzmann and Molecular Dynamics Models for Dense Fluids [J]. Phys. Rev. E, 2007, 75(4): 046704
- [18] Delgado-Buscalioni R, Convey P V. USHER: An Algorithm for Particle Insertion in Dense Fluids [J]. J. Chem. Phys., 2003, 119(2): 978-987
- [19] Berendsen H J C, Postma J P M, Van Gunsteren W F, et al. Molecular Dynamics with Coupling to an External Bath [J]. J. Chem. Phys., 1984, 81: 3684-3690