

液气共存的耗散粒子动力学模拟*

王晓亮 陈 硕[†]

(同济大学航空航天与力学学院, 上海 200092)

(2009 年 11 月 5 日收到; 2009 年 12 月 13 日收到修改稿)

传统的耗散粒子动力学方法(DPD)由于采用了纯排斥的守恒力相互作用,从而不能适应液气共存或者带有自由面流体的模拟.这里研究了DPD方法中新近提出的一种短程排斥、长程吸引相互作用,探索了这种改进势能对于DPD方法模拟液气共存的能力.模拟了这种新势能所形成的液气过渡界面,计算了过渡界面区的应力分布,发现应力分布与多体DPD方法所得结果一致.进一步对表面张力进行了研究,验证了这种势能所形成的界面满足Laplace定律,而通过理论公式与Laplace定律分别所得到的表面张力也彼此相符.

关键词: 耗散粒子动力学, 液气共存, 液滴, 表面张力

PACC: 0340G, 0570, 4710, 4755K

1. 引 言

微电子机械系统微通道和微网络中经常会产生微小尺度空间的复杂流动^[1],目前快速发展的微流体技术,例如气泡微加工、喷射微液滴的微尺度加工等技术中,也常常要研究流体在微尺度通道中的流动行为,这涉及介观尺度条件下各种类型的浸润现象、毛细问题以及自由面现象等;此外像凝胶、胶体、高分子聚合物悬浮液、蛋白质和DNA分子悬浮液等复杂流体的流动行为其产生的基本原因是由复杂流体本身的特征微观结构所决定,而不必为最细节的分子结构^[2],诸多学者^[3,4]已经运用格子Boltzmann方法(LBM),实验手段等方法研究了这类介观尺度现象的力学和传热特性.因此发展适宜的介观尺度数值模拟技术是近年来国际计算机模拟领域的发展趋势.其中,一个重要的方面就是能够模拟液气共存或带有自由面流体的流动行为.

耗散粒动力学(dissipative particle dynamics,简称DPD)是一种新兴的介观尺度流体模拟技术,于1992年由Hoogerbrugge和Koelman提出^[5].在DPD中,基本的单元是一些离散的被称为“粒子”的动量载体,这些所谓的“粒子”具有粗粒化的概念,即每

颗粒子的运动代表的是大量分子的集体行为;各粒子之间由保守力、耗散力和随机力相互作用.由于这些粒子之间的相互作用比分子之间的相互作用“软”得多,因此可以采用比分子动力学大得多的时间步长.另一方面,DPD可以理解为宏观的微分流动控制方程在小尺度上的随机描述^[6],从这个意义上说,DPD方法是连接微观分子动力学方法和宏观流体力学方法的一座桥梁,是一种真正意义上的介观尺度的流体模拟技术.

然而,正是因为传统的DPD方法中粒子之间采用的是“软”相互作用,致使压力不完全与密度的立方成正比,从而不能模拟液气共存或者带有自由面流体的流动问题.如果要获得液气共存,则对于单组分系统,状态方程(equation of state,简称EOS)要求满足van der Waals曲线,传统DPD中采用的“软”相互作用使压力和密度之间产生的是“二次方关系”而非“三次方关系”的EOS,这是传统DPD在模拟液气共存时本质上的困难^[7].

针对上述DPD在模拟液气共存方面存在的困难,目前国际上有个别学者对标准DPD进行了改进,希望在继续拥有“软”相互作用的同时,能够模拟液气共存现象.Pagonabarrage等^[8,9]提出了一种“多体”DPD(MDPD)方法,其中软相互作用排斥力

* 国家自然科学基金(批准号:10872152)和上海市教委科研创新重点项目资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: schen_tju@mail.tongji.edu.cn

与流体局部密度相关;而流体局部密度又依赖于与所讨论粒子相邻的其他粒子的位置. Warren^[10,11]就“多体”DPD方法对液气共存展开了讨论,指出为了得到稳定的液气界面,除了使流体的状态方程满足 van der Waals 曲线以外,还应考虑粒子之间的相互作用范围. Liu 和常建忠等^[1,2,12,13]基于吸引力和排斥力不同的影响范围,提出了一种液气共存模型,其中短程排斥相互作用由光滑粒子动力学 (SPH) 中光滑函数所采用的多项式样条函数表示,长程吸引相互作用也具有相似的多项式样条函数形式,粒子之间的相互作用包含了上述两种作用的组合. 应用该方法,他们模拟和研究了微液滴的静态和动态性质,并进一步模拟了微通道内以及多孔介质中两相流动现象. Tiwari 等^[14]基于平均场理论提出的模型中流体的自由能与流体的密度及其梯度相关联,并且密度梯度与长程吸引力有关.

2. DPD 方法及其改进

DPD 是一种以统计力学为基础的介观尺度流体模拟方法. 在 DPD 系统中,基本单元被称作粒子的离散动量载体,它们在连续的空间内运动,这些粒子是一些具有质量没有大小的粗粒化实体,每颗粒子的运动代表大量分子的集体运动行为.

2.1. 控制方程

DPD 系统中每个粒子的运动由 Newton 第二定律描述,对于编号为 i 的粒子

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}_i}{dt} &= \mathbf{v}_i, \\ \frac{d\mathbf{v}_i}{dt} &= \mathbf{f}_i + \mathbf{F}_e, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 \mathbf{r}_i 和 \mathbf{v}_i 为粒子 i 的位置和速度矢量; \mathbf{f}_i 为所有其他粒子 (不包括粒子 i 本身) 作用在粒子 i 上的力; \mathbf{F}_e 为粒子所受到的外场力, t 为时间. DPD 系统中假定所有的粒子都有同样的质量,采用无量纲单位质量作为粒子的质量,即 $m_i = m = 1$.

\mathbf{f}_i 由保守力、耗散力和随机力三部分构成,表达式为

$$\mathbf{f}_i = \sum_{j \neq i} (\mathbf{F}_{ij}^C + \mathbf{F}_{ij}^D + \mathbf{F}_{ij}^R), \quad (2)$$

其中 \mathbf{F}_{ij}^C 表示保守力 (conservative force)、 \mathbf{F}_{ij}^D 表示耗散力 (dissipative force)、 \mathbf{F}_{ij}^R 表示随机力 (random

force), 其中角标 ij 表示粒子 i 和粒子 j 之间的两两相互作用. 3 个分量只有在一定距离范围内起作用,该距离定义为截断半径,并且选作无量纲程度单位 $r_c = 1$.

粒子 j 作用在粒子 i 上的耗散力 (或称为阻力) \mathbf{F}_{ij}^D 可以表达为

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -\gamma w^D(r_{ij}) (\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \hat{\mathbf{r}}_{ij}. \quad (3)$$

$w^D(r_{ij})$ 是与粒子间距离 r_{ij} 有关的权重函数,叫做耗散力权重函数,当 $r_{ij} > r_c$ 时, $w_D = 0$; \mathbf{v}_{ij} 为粒子之间相对速度, $\mathbf{v}_{ij} = \mathbf{v}_i - \mathbf{v}_j$; γ 为耗散系数, γ 前面的负号表明耗散力的作用方向总是和相对速度 \mathbf{v}_{ij} 方向相反.

耗散力的作用总是阻止粒子之间的相对运动,因此耗散力作用的结果会降低系统的动能. 系统动能的降低将由随机力 \mathbf{F}_{ij}^R 引起的粒子的随机运动进行补偿,随机力 \mathbf{F}_{ij}^R 可表达为

$$\mathbf{F}_{ij}^R = \sigma w^R(r_{ij}) \xi_{ij} \hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (4)$$

其中 σ 为随机力系数; $w^R(r_{ij})$ 也是与粒子之间距离 r_{ij} 有关的权重函数,称为随机力权重函数,当 $r_{ij} > r_c$ 时 $w^R(r_{ij})$ 为零; ξ_{ij} 是均值为零、方差为 Δt^{-1} 的随机变量.

与系统的涨落-耗散理论相类似,要求 (3), (4) 式中的两个权重函数之间、耗散力系数 γ 和随机力系数 σ 之间相互关联,关联式中的变量只能任选一个. 关系式表达如下:

$$w^D(r_{ij}) = [w^R(r_{ij})]^2, \quad (5)$$

$$\sigma^2 = 2\gamma k_B T, \quad (6)$$

(6) 式中 $k_B T$ 为系统的 Boltzmann 温度. 在 DPD 中常取 $k_B T = 1$.

保守力 \mathbf{F}_{ij}^C 是一种软排斥力,作用在两粒子质心连线方向上,其表达式为

$$\mathbf{F}_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij} \left(1 - \frac{r_{ij}}{r_c}\right) \hat{\mathbf{r}}_{ij} & (r_{ij} < r_c), \\ 0 & (r_{ij} \geq r_c). \end{cases} \quad (7)$$

其中 a_{ij} 为保守力系数,表示粒子 i 与粒子 j 之间最大的排斥力值; $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$, $r_{ij} = |\mathbf{r}_{ij}|$, $\hat{\mathbf{r}}_{ij} = \frac{\mathbf{r}_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|}$.

2.2. 保守力改进

传统的 DPD 方法中,保守力表达式由 (7) 式给出,其中保守力权重函数为一个纯排斥的线性递减函

数,在截断半径处为零. 这样的作用迫使粒子远离彼此,占据整个计算空间. 经过国内外许多学者的努力,该保守力函数成功地应用于受限空间内流体流动的模拟^[15,16]. 但是如前所述该保守力函数无法模拟液气共存的情况,这是传统 DPD 方法的局限.

$$W(r) = W(r, r_c) = \begin{cases} 1 - \frac{3}{2}(2r/r_c)^2 + \frac{3}{4}(2r/r_c)^3 & (0 \leq 2r/r_c < 1), \\ \frac{1}{4}(2 - 2r/r_c)^3 & (1 \leq 2r/r_c < 2), \\ 0 & (2r/r_c \geq 2). \end{cases} \quad (8)$$

这里 r_c 为截断半径,对应于 SPH 方法中的光滑长度 h , 该 3 次样条函数是非负,单调减少的,并且在左右端点处保持光滑. 选取这种 3 次样条函数的一种线性组合,分别配以不同的系数和截断半径,然后乘以作用强度 a , 从而得到粒子间相互作用势,表达式为

$$U(r) = a[AW(r, r_{c1}) - BW(r, r_{c2})], \quad (9)$$

这里 $W(r, r_{c1}), W(r, r_{c2})$ 为 (8) 式中的 3 次样条, r_{c1}, r_{c2} 为截断半径, A, B 为可调系数, a 为守恒力系数. DPD 粒子间守恒力即为该作用势梯度的相反数,即

$$\mathbf{F}_{ij}^c = -\frac{dU}{dr}\hat{\mathbf{r}}_{ij}. \quad (10)$$

仿照权函数的定义方式,同样可以把 (10) 式写为

$$\mathbf{F}_{ij}^c = -\frac{dU}{dr}\hat{\mathbf{r}}_{ij} = aw_{ij}(r)\hat{\mathbf{r}}_{ij}, \quad (11)$$

其中 $w_{ij}(r) = -(AW(r, r_{c1})' - BW(r, r_{c2})')$ 就是守恒力权函数.

该保守力的势能函数为近程排斥和远程吸引相互作用的组合,通过各参数的调节,可得到不同的短程排斥、长程吸引作用. 例如本文用到的势能函数的一条权函数曲线如图 1 所示,其中 $A = 2.0$, $B = 1.0$, $a = 9.5$, 即 $U(r) = 19.0W(r, 0.8) - 9.5W(r, 1.0)$.

图 1 中可以发现,当 r 比较小时,权函数为正,当 r 约为 0.6 时,权函数改变符号,进入负区域,直至截断半径处变为零. 图中也给出了传统 DPD 方法的守恒力权函数是一条直线,且完全大于零. 由此可见,我们引入的守恒力是一个短程排斥长程吸引作用.

为了能使 DPD 具有模拟液气共存现象或者带有自由面流体的能力, Liu^[1, 2, 12] 提出可参考 SPH 中的光滑函数,引入由 3 次样条函数线性组合形成新的 DPD 势能, SPH^[17] 方法中最常用的光滑函数为

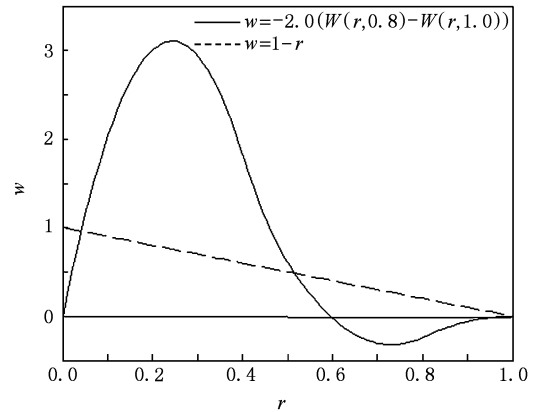


图 1 改进的势能权函数与传统 DPD 权函数的比较

2.3. DPD 参数对系统状态方程和液气密度比的影响

Van der Waals 方程能够在一定程度上描述液气共存现象, Liu^[2] 指出,引入的短程排斥、长程吸引作用能够在一定条件下符合 van der Waals 方程,我们同样也作了一些数值模拟. 例如势能函数选取为 $U(r) = 8.0W_1(r, 0.8) - 4.08W_2(r, 1.0)$, 温度 $k_B T = 1.0$ 时所模拟的结果如图 2 所示: 其中空心圆为我们 DPD 模拟的结果,实线为所拟合的 van der Waals 曲线,拟合的方程为 $p = \frac{\rho k_B T}{1 - 0.0134\rho} - 0.0333\rho^2$, 点划线为同样温度下的理想气体的状态方程曲线. 可以发现, DPD 系统模拟的结果与 van der Waals 曲线相当接近,比理想气体状态曲线偏低,这充分说明我们引入的短程排斥长程吸引作用能够在一定条件下适应 van der Waals 状态曲线;而且当流体密度较大时,该势能函数能更好地满足

van der Waals 方程.

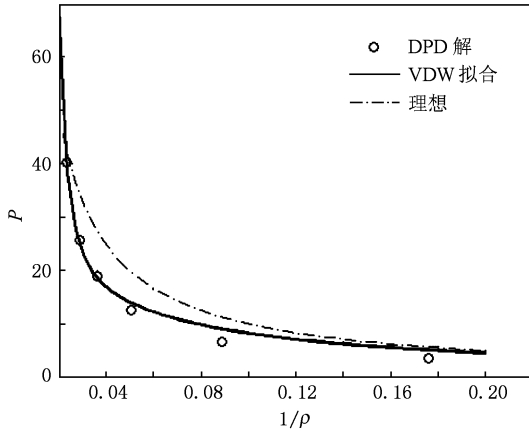


图2 DPD 模拟液气共存的状态图

令参数 a, A, r_{c1}, r_{c2} 均固定不变, 分别为 18.75, 2.0, 0.8 和 1.0, 改变 B 的大小, 从而可以模拟不同的长程吸引作用. 所有模拟的温度控制在 1.0. B 的值从 0.1 变化到 1.1, 经过一系列数值模拟, 得到了液气共存现象和相分离, 其中当 B 为 0.8 时稳定状态粒子的分布图如图 3 所示, 其中势能函数 $U(r) = 39.5W_1(r, 0.8) - 15.0W_2(r, 1.0)$, $k_B T = 1.0$. 可以发现, 某些地方粒子分布密, 某些地方粒子分布疏, 但是并不能形成明显的相分离. 说明较小的 B 代表很微弱的长程吸引作用, 并不能形成稳定的相分离和液气界面.

如果 B 增加到 1.0, 模拟结果显示最后稳定状态粒子的分布图如图 4 所示, 其中势能函数 $U(r) = 39.5W_1(r, 0.8) - 18.75W_2(r, 1.0)$, $k_B T = 1.0$. 可以发现, 较大的长程吸引作用已经能够形成明显的相分离, 进入液相空间的粒子和跑出液相空间的粒子达到平衡, 实现了液气共存现象的模拟.

3. 液气界面应力研究

为了对液气共存进一步研究, 我们选用势能函数 $U(r) = 17.0W(r, 0.8) - 9.5W(r, 1.0)$, 温度为 $k_B T = 0.5$ 的条件进行数值模拟. 在 $20 \times 20 \times 20$ 的区域内注入 5960 个简单 DPD 粒子, 在 x, y, z 方向上都施加周期性边界条件, 在上述 DPD 条件下系统达到稳定状态, 并统计各个力学参数. 由于模拟是三维情况, 所以最后模拟结果形成一个被气体包围的球形液滴, 图 5 给出了稳定状态下粒子的三维分布图. 将三维空间划分成 $31 \times 31 \times 40$ 的格子, 系统达

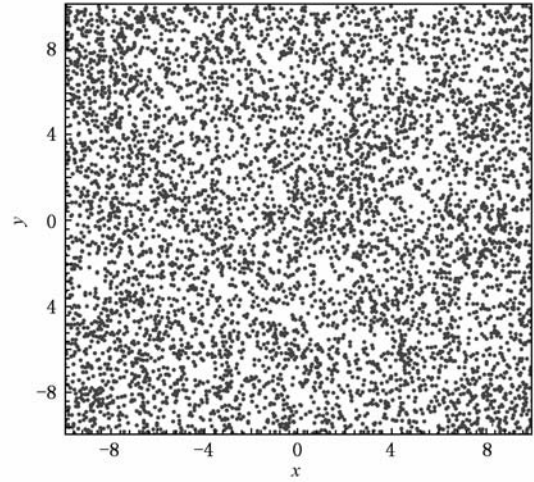


图3 无相分离时平衡状态粒子分布

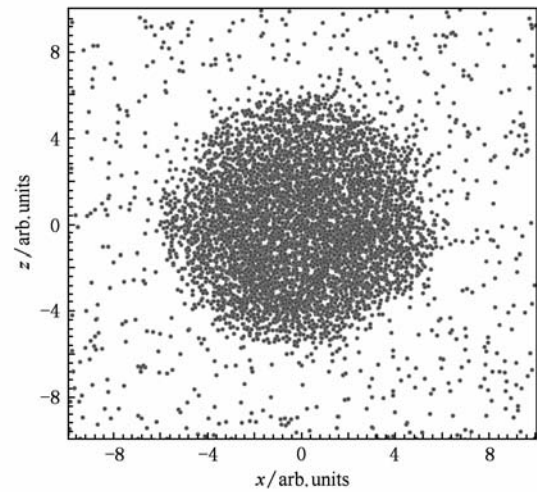


图4 出现相分离时平衡状态粒子分布

到平衡状态以后, 每隔 20000 步按时间统计平均, 统计其压力、密度等分布, 其中应力张量的统计方法采用 Irving-Kirkwood^[18] 公式计算

$$S_{\alpha\beta} = -\frac{1}{V} \left\langle \sum_i m_i u_{i\alpha} u_{i\beta} + \sum_i \sum_{j>i} r_{ij\alpha} F_{ij\beta} \right\rangle. \quad (12)$$

这里 m_i 是 DPD 粒子的质量, DPD 方法中一般令其为 1, N 为统计的粒子数, V 为体积, $u_{i\alpha}$ 和 $u_{i\beta}$ 是粒子的本动速度分量, 其大小为, $u_{i\alpha} = v_{i\alpha} - v_\alpha(x)$, 这里 $v_\alpha(x)$ 指的是 x 处的流场速度, 尖括号表示整体平均. 压力由应力张量的迹得到

$$p = -\frac{1}{3} \text{tr} \mathbf{S}. \quad (13)$$

图 6 给出了通过液滴中心线 ($x = 0, y = 0$) 沿

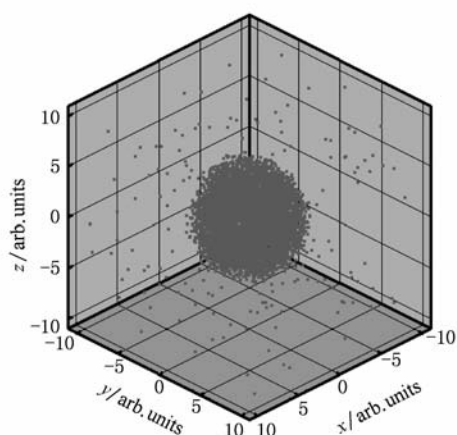


图 5 DPD 系统平衡状态下粒子分布示意图

着 z 轴的密度分布曲线,其中模拟参数与图 5 一致. 由图可见液气过渡界面比较陡. 其中液相空间密度分布较均匀,约为 12.5,而气相空间密度很小,统计显示其约为 0.3,两者相差 400 多倍. Warren^[10] 用 MDPD 方法计算模拟得到了从液相空间过渡到气相空间时稳定的液气界面. Warren 采用了 3 组不同温度,分别为 0.5, 1.0, 2.0. 图 7 给出了 Warren^[10] 模拟的液气界面密度分布,其中从内至外模拟所对应的温度分别为 0.5, 1.0, 2.0. 我们模拟选用的温度为 0.5,对比图 6 与 7,可以发现密度分布曲线两者类似,这进一步说明引入的新势能函数对于模拟液气共存的有效性.

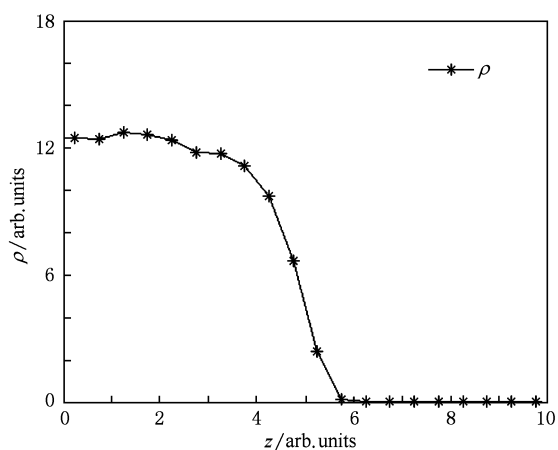


图 6 界面密度分布

图 8 给出了通过液滴中心线沿着 z 轴的法向应力 P_n 和切向应力 P_t 之差 ($P_n - P_t$) 的分布,其中 $P_n = P_{zz}$, $P_t = 0.5(P_{xx} + P_{yy})$. 由于在气相空间内部不存在表面张力,所以 P_n 和 P_t 应该相等. 图 8 显示,

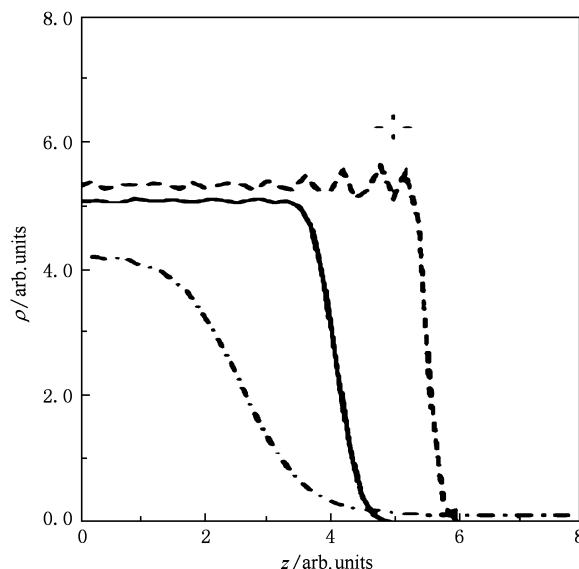


图 7 MDPD 模拟的液气界面密度曲线

在气相空间 ($P_n - P_t$) 为零;在液气过渡界面处, ($P_n - P_t$) 有一个较小的波动,然后又变大到达峰值,表面张力就是在这个区域产生的;在液相空间内 P_n 和 P_t 基本能够保持相等. 图 8 显示在液相空间内 ($P_n - P_t$) 之值在零附近波动. $P_n - P_t$ 的变化规律和 Pagonabarraga^[8] 用多体 DPD 模拟的结果相同. 图 9 给出了 Pagonabarraga^[8] 所模拟的液气界面的 ($P_n - P_t$) 的分布,可以发现 ($P_n - P_t$) 在气相空间内基本为零 (图 9 中粗实线),在界面区出现张力,在液相空间存在波动,但是其平均值为零;我们的模拟结果与 Pagonabarraga^[8] 的结果趋势相一致. 图 8 还给出 ($P_n - P_t$) 通过整个区域沿 z 轴的积分线 (图中虚线所示),对照图 6,可以发现 ($P_n - P_t$) 积分发生突变的位置正好是液气界面处,而积分曲线突变的幅度与表面张力之值相对应.

我们进一步比较了表面张力的计算. 利用 Irving-Kirkwood^[18] 方法,表面张力为

$$\sigma = \int [p_{zz} - (p_{xx} + p_{yy})/2] dz, \quad (14)$$

这里 p_{xx} , p_{yy} 和 p_{zz} 为 (12) 式应力张量 $S_{\alpha\beta}$ 的对角线上的 3 个分量,按照 (14) 式表面统计结果为 $\sigma = 3.320$. 带自由面的流体,其界面处表面张力与界面内外压差满足 Laplace 定律为

$$P_{in} - P_{out} = \sigma_s \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right), \quad (15)$$

这里 P_{in} , P_{out} 为内外压力, σ_s 为表面张力, R_1 , R_2 为曲面的两个主曲率半径. 对于球形液滴, Laplace 定

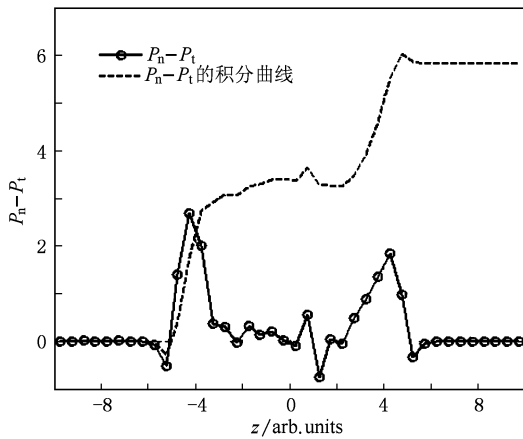


图 8 液气界面的 $P_n - P_t$ 的分布

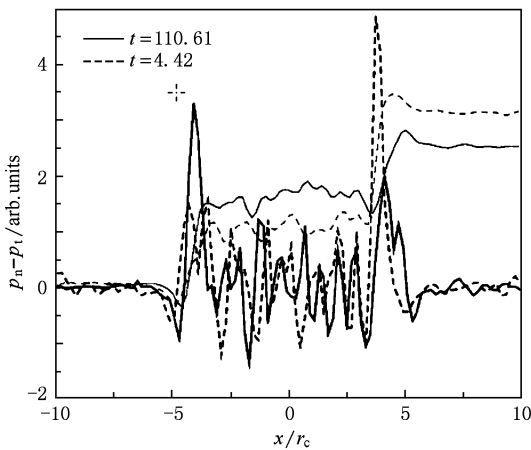


图 9 MDPD 模拟的 $P_n - P_t$ 分布

律简化为

$$P_{in} - P_{out} = \sigma_s \frac{2}{R}, \quad (16)$$

这里 R 为球形液滴的半径.

在一定的 DPD 参数条件下, 即 $A = 2.0, B = 1.0, a = 9.5, k_B T = 0.5$, 分别对包含 2828, 3766, 4922, 5960, 7910, 11950, 16312 个粒子的 DPD 系统作了数值模拟, 用(12), (13)式统计其压力. 由于气相空间压力很小, 其值不到液相空间压力的 1%, 因此可以近似把液相空间的压力看作为内外压强差, 其中含 5960 个粒子的 DPD 系统模拟的压力通过液滴中心沿 z 轴的分布如图 10 所示, 在气相空间压力基本为零, 界面处压力为负值, 这是界面处粒子主要为吸引作用, 从而形成表面张力, 又由于球形液气存在曲率, 因此表面张力使得液滴内部的压力比液滴外部大. 从图 10 可以发现液滴内部压力存在一

定的波动, 这主要是由于三维情况下的统计格子太小的缘故. 关于球形液滴半径的计算, 假定所有的粒子都存在于液相空间, 这样的假设是合理的, 因为液滴外部的密度仅为液滴内部的 1/400, 并且假设液滴为完全的球形, 这样液滴的半径 R 的计算公式如下:

$$R = \sqrt[3]{\frac{3N}{4\pi\rho_{eq}}}, \quad (17)$$

这里 N 是粒子总数, ρ_{eq} 为平衡状态下液相空间的平均密度. 利用线性拟合得到液滴内外压差 Δp 和 $2/R$ 的关系, 这是一条通过原点的直线, 如图 11 所示, 其斜率也就是表面张力 (见 (16) 式), 该值为 3.245, 相对按照统计理论所得的结果 $\sigma = 3.320$, 两者之间的相对误差为 2.3%, 验证了采用该势能所得结果满足 Laplace 定律. Tiwari 等^[14] 通过基于平均场理论得到的势能函数验证了两维情况下的 Laplace 定律.

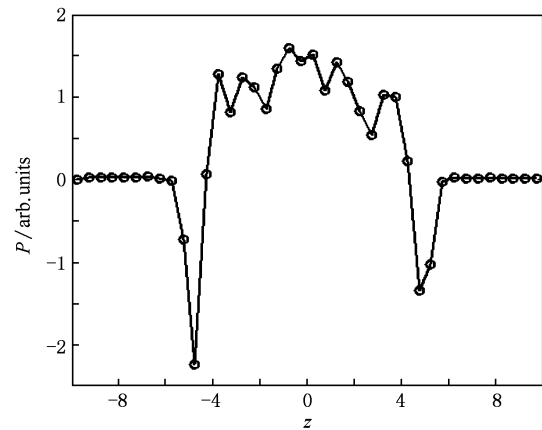


图 10 通过液滴中心沿 z 轴的压力分布曲线

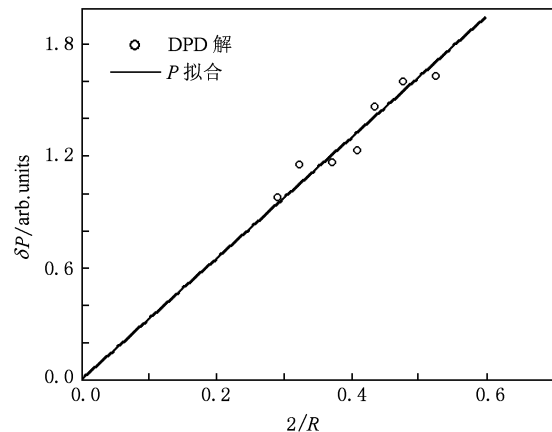


图 11 压力差 δP 关于 $2/R$ 的线性拟合

4. 结 论

针对传统的 DPD 方法不能模拟液气共存现象的缺陷,寻求采用一种最近提出的改进 DPD 方法来模拟液气共存;与传统的 DPD 方法不同,该改进的 DPD 方法引入短程排斥、长程吸引的粒子间相互作用.模拟了这种新势能所形成的稳定液气过渡界面,计算了过渡界面区的应力分布,对表面张力进

行的研究表明,这种势能所形成的界面满足 Laplace 定律;而通过理论公式与 Laplace 定律分别所得表面张力也彼此相符,两者之间的相对误差仅为 2.3%.在此基础上,利用这种改进的 DPD 方法,可以进一步对微电子机械系统器件中带有自由面的流体的流动行为进行深入的分析.

感谢中国科学院力学研究所刘谋斌研究员有益的讨论.

-
- [1] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *Phys. Fluids* **19** 033302
 - [2] Liu M B, Meakin P, Huang H 2006 *Phys. Fluids* **18** 017101
 - [3] Sun Q C, Wang G Q 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4667 (in Chinese) [孙其诚、王光谦 2008 物理学报 **57** 4667]
 - [4] Sun D K, Zhu M F, Yang Z R, Pan S Y, Dai T 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** S285 (in Chinese) [孙东科、朱鸣芳、杨朝蓉、潘诗琰、戴挺 2009 物理学报 **58** S285]
 - [5] Hoogerbrugge P J, Koelman J M V A 1992 *Europhys. Lett.* **19** 155
 - [6] Marsh C A 1998 *Ph. D. Dissertation* (Oxford: University of Oxford)
 - [7] Groot R D, Warren P B 1997 *Phys. Rev. Lett.* **107** 4423
 - [8] Pagonabarraga I, Frenkel D 2001 *J. Chem. Phys.* **115** 5015
 - [9] Pagonabarraga I, Frenkel D 2000 *Mol. Simul.* **25** 167
 - [10] Warren P B 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 225702
 - [11] Warren P B 2003 *Phys. Rev. E* **68** 066702
 - [12] Chang J Z, Liu M B, Liu H T 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3954 (in Chinese) [常建忠、刘谋斌、刘汉涛 2008 物理学报 **57** 3954]
 - [13] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *Water Resour. Res.* **43** W04411
 - [14] Tiwari A, Abraham J 2006 *Phys. Rev. E* **74** 056701
 - [15] Novik K E, Coveney P V 2000 *Phys. Rev. E* **59** 6342
 - [16] Chen S, Phan-Thien N, Fan X J 2004 *J. Non-Newton. Fluid Mech.* **118** 65
 - [17] Liu M B, Liu G R, Lam K Y 2003 *J. Comput. Appl. Math.* **155** 263
 - [18] Irving J H, Kirkwood J G 1950 *J. Chem. Phys.* **18** 817

Simulation of vapor-liquid coexistence using dissipative particle dynamics *

Wang Xiao-Liang Chen Shuo[†]

(*School of Aerospace Engineering and Applied Mechanics, Tongji University, Shanghai 200092, China*)

(Received 5 November 2009; revised manuscript received 13 December 2009)

Abstract

Due to a purely repulsive conservative interaction adopted in the traditional dissipative particle dynamics, the vapor-liquid coexistence phenomena or fluid flows with free surfaces could not be simulated. In the present study a recently proposed combination of short-range repulsive and long-range attractive interaction for DPD was investigated to explore its ability of simulating vapor-liquid coexistence or fluid flows with free surfaces. With this modified interaction, steady vapor-liquid interface could be obtained in DPD simulation, and the stress distribution across the vapor-liquid interface region was also discussed, which were found in accordance with those obtained by multibody DPD. Furthermore, surface tension of vapor-liquid interface was studied, and it was verified that Laplace's law is satisfied in our simulation. Surface tensions obtained by theoretical method and Laplace's law, respectively, are in agreement with each other.

Keywords: dissipative particle dynamics, vapor-liquid coexistence, drop, surface tension

PACC: 0340G, 0570, 4710, 4755K

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10872152) and the Innovation Program of Shanghai Municipal Education Commission, China.

[†] Corresponding author. E-mail: schen_tju@mail.tongji.edu.cn