

论文分类号：TP 122.5  
密    级：公开

单 位 代 码：XXXXX  
研究生学号：2007412125

**吉    林    大    学**  
**硕    士    学    位    论    文**

**微/纳流控芯片中多尺度问题的数值模拟研究**

Study on numerical simulation of multiscale  
phenomena in microfluidic and nanofluidic chips

作者姓名：张银鹤

专    业：机械设计及理论

导师姓名

及 职 称：左春桢 教授

学位类别：工学硕士

论文起止年月：2007 年 10 月 至 2009 年 5 月

## 吉林大学硕士学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的硕士学位论文，是本人在指导教师的指导下，独立进行研究工作所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本论文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的作品成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。本人完全意识到本声明的法律结果由本人承担。

学位论文作者签名：

日期：      年   月   日

## 《中国优秀博硕士学位论文全文数据库》投稿声明

研究生院：

本人同意《中国优秀博硕士学位论文全文数据库》出版章程的内容，愿意将本人的学位论文委托研究生院向中国学术期刊（光盘版）电子杂志社的《中国优秀博硕士学位论文全文数据库》投稿，希望《中国优秀博硕士学位论文全文数据库》给予出版，并同意在《中国博硕士学位论文评价数据库》和 CNKI 系列数据库中使用，同意按章程规定享受相关权益。

论文级别：☒ 硕士 ☐ 博士

学科专业：机械设计及理论

论文题目：微/纳流控芯片中多尺度问题的数值模拟研究

作者签名：

指导教师签名：

年 月 日

作者联系地址（邮编）：长春市人民大街 5988 号，130025

作者联系电话：(+86) 13944932974

作者姓名	张银鹤	论文分类号	TP 122.5	
保密级别	公开	研究生学号	2007412125	
学位类别	工学硕士	授予学位单位	吉林大学	
专业名称	机械设计及理论	培养单位 (院、所、中心)	吉林大学 机械学院	
研究方向	现代机械设 计理论及方 法	学习时间	2007 年 9 月 至2009 年 5 月	
论文中文题目	微/纳流控芯片中多尺度问题的数值模拟研究			
论文英文题目	Study on numerical simulation of multiscale phenomena in microfluidic and nanofluidic chips			
关键词 (3-8个)	微纳流控, 多尺度模拟, 区域分解, 电渗流			
导师情况	姓名	左春桢	职称	教授
	学历学位	博士	工作单位	吉林大学机械学院
论文提交日期	0000年00月00日		答辩日期	0000年00月00日
是否基金资助项目	否	基金类别及编号		
如已经出版, 请填写以下内容				
出版地 (城 市 名、 省 名)			出版者 (机构) 名称	
出版日期			出版者地址 (包括 邮编)	

# 内 容 提 要

本文在评论国内外数字微流体技术的研究现状的基础上，讨论了介电润湿理论、结构设计和系统集成设计技术。

阐明了介电润湿系统中的流场与电场控制方程，利用数值模拟技术对系统的电场进行了分析与仿真。结果表明双电层对介电润湿系统的影响很小，液滴中的电场强度相对较小并随液滴的移动和形状的改变而不断变化，与电极接触的介电层受到变化电场的作用。

在研究格子波尔兹曼算法的基础上，总结了瞬态仿真程序和稳态仿真程序的设计流程。仿真了液滴在初始状态时的稳态形状。研究了液滴在方波电压信号作用时的平均速度响应，结果表明方波电压宽度、上下极板间距和流固界面作用力强度对平均速度均有较大影响。对三种结构设计的对比仿真表明液滴形态变化和液滴驱动速度受结构设计的影响较大。

**关键词：**微纳流控，多尺度模拟，区域分解，电渗流

## 目 录

第1章 中文测试 .....	1
1.1 节测试 .....	1
1.1.1 小节测试 .....	1
1.2 节测试 .....	4
1.2.1 小节测试 .....	4
1.3 节测试 .....	4
1.4 节测试 .....	4
1.5 节测试 .....	4
第2章 本课题的目的及意义 .....	5
第3章 微/纳流控芯片中多尺度问题的国内外研究现状 .....	7
3.1 微/纳流控芯片中多尺度问题的国外研究现状 .....	7
3.2 微/纳流控芯片中多尺度问题的国内研究现状 .....	8
第4章 研究内容和创新及技术路线 .....	10
4.1 研究内容 .....	10
4.2 创新点 .....	10
4.3 技术路线 .....	10
第5章 计划进度 .....	11
参考文献 .....	12



## 第 1 章 中文测试

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

### 1.1 节测试

如公式 1-1 所示：

$$\begin{cases} \pi = 3.141 \dots \\ \sqrt{2} = 1.414 \dots \end{cases} \quad (1-1)$$

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

#### 1.1.1 小节测试

“测试”，微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

“测试”，微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国



家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

**1.1.1.1 小小节测试** 微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标，特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展，使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得

日趋重要。因此，在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后，世界科技发达国家都积极投资这一科技领域，期待在新的世纪里处于领先地位。

流场流型<sup>[3]</sup>

流场流型<sup>[3]</sup>

L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X 2<sub>ε</sub>T<sub>E</sub>X

## 1.2 节测试

### 1.2.1 小节测试

#### 1.2.1.1 小小节测试

## 1.3 节测试

## 1.4 节测试

## 1.5 节测试

leftmark: 第 1 章 中文测试

## 第 2 章 本课题的目的及意义

微型化是光电、半导体等高科技相关产业的努力目标,特别是随着微电子及分子生物领域的快速发展,使得在受限狭小空间内的热与流体传输现象变得日趋重要。因此,在微米尺度的微机电系统成为尖端科技后,世界科技发达国家都积极投资这一科技领域,期待在新的世纪里处于领先地位<sup>[1][1]</sup>。过去十年来,已经可以利用微加工和微制造(micromachining and microfabrication)技术来制造纳米和微米大小的装置,进而使得能够研究这种尺度的物体。

自从 Manz 等人<sup>[2,3][2][3]</sup>提出了微全分析系统(miniaturized total analysis system,  $\mu$ TAS, 或称为芯片实验室, lab-on-a-chip)的概念以来,生物和化学装置的微型化吸引了很多的注意并取得了快速发展<sup>[4][4]</sup>。集成的芯片实验室装置能够将许多常规的房屋大小的实验室所必须的组件和功能包含到一个小芯片里去,此芯片可以进行一项特定的生物或化学分析,包括样品处理,输运,反应和检测。微全分析系统的应用领域已经大为拓展,从反应器集成到快速高效分离,从微型混合器到 DNA 检测、蛋白质和核酸的分析<sup>[4-7][4][5][6][7]</sup>。但是,开发这种芯片实验室装置并不是简单的缩小传统仪器的尺寸,它需要对跨度从厘米到纳米的许多多尺度(multiscale)物理和化学现象的理解和控制<sup>[8][8]</sup>(见图 2-1)。

Diameter of glucose molecule	1 nm
Diameter of DNA helix	2 nm
Diameter of insulin molecule	5 nm
Thickness of cell wall (gram negative bacteria)	10 nm
Size of typical virus	75 nm
Diameter of the smallest bacterium	200 nm
Diameter of red blood cell	8.4 $\mu$ m
Diameter of average cell in human body	10 $\mu$ m
Diameter of the largest bacterium	750 $\mu$ m

图 2-1: 生物学中典型物体的长度尺度(摘自<sup>[8][8]</sup>)

微型化带来了许多新的问题。在这些芯片实验室中,流体和样品的输运是一个关键的问题,因为许多生物和化学过程和实验发生在水溶液环境中。微/纳米尺度下流体的基本性质和更大的装置中显著不同。对于气体流动,连续 Navier-Stokes 方程仅当 Knudsen 数  $Kn < 0.1$  时有效,而非滑移边界条件在更严格的  $Kn < 0.001$  时才成立。对于液体流动,

微尺度 ( $100\text{nm} \sim 100\mu\text{m}$ ) 下的流体现象仍然可以由连续介质理论描述, 但是长度尺度的减小使得表面力和电动效应 (surface force and electrokinetic effects) 变得重要而惯性力不重要了。当流体通道的尺寸继续减小到  $100\text{nm}$  以下就是纳流控的领域了。流体不能考虑为连续介质, 而是作为独立分子构成的整体了。在这种尺度下, 表面体积比 (surface-to-volume ratio) 很高, 非滑移边界条件不完全成立, 流体的本构关系严重受边界存在的影响。微尺度/纳尺度流体力学的研究对于此尺度下芯片实验室装置的理解和开发很重要。

微流控和纳流控中的流体运动一般通过对通道中应用压力差或沿通道方向施加电场产生。压力驱动流 (pressure-driven flow) 通常具有抛物线型流动分布, 降低了分析效率。此外, 因为液阻和通道横向尺寸的四次方成反比, 在微流控和纳流控装置中产生液体流动需要很大的液压, 导致许多利用压力驱动流的设计不实用。能够替代压力驱动流的是电动泵吸, 其易于控制而且相比于压力驱动流对通道大小比敏感。电动泵吸的优点在于流动呈塞子状 (plug-like), 并且假如通道的直径远大于德拜长度 (Debye length, 对于标准缓冲液条件约  $1 \sim 10\text{nm}$ ) 流动分布和通道大小无关。电动的机理, 包括电渗、电泳和 (交流、直流) 介电泳, 在微/纳尺度装置中正起着越来越重要的作用<sup>[9]</sup>。

然而, 几个因素使得微/纳尺度现象的模拟复杂了, 使得其与宏观模拟不同。首先和最重要的因素是相关长度尺度的范围大, 可以变化达7个数量级 (从德拜长度,  $\text{nm}$ , 到通道长度和基底厚度,  $\text{cm}$ )。其二, 尺寸的减小显著增加了表面和界面现象的相对重要性。微型装置中流体和材料的性质通常发生迅速和局部的改变。数值模拟的另一个难题是模拟所固有的多物理现象, 这通常结合了流体力学, 热传递, 电动现象, 电场或压力场, 化学和生物热力学, 以及反应动力学。通常, 所有这些方面都学要考虑才能为真正的芯片实验室装置提供数值模拟的可靠参考。

本文拟利用多尺度数值模拟方法来分析微/纳流道流体流动的多尺度现象。数值模拟技术已经和实验研究和理论研究一道, 成为科学研究不可缺少的工具。数值模拟能为微流控/纳流控装置的设计提供极大的帮助。模拟使得研究人员能够快速确定设计上的改变将如何改变芯片的性能, 从而减少原型迭代的次数。当前, 国内微流控和纳流控多尺度现象的研究处于起步阶段, 本文展开的研究构建在分析国外微/纳流控研究和技术发展及应用的基础上, 有助于填补国内的一些技术空白, 对于我国  $\mu\text{TAS}$  系统的研究和应用水平的发展有积极意义。



## 第3章 微/纳流控芯片中多尺度问题的国内外研究现状

### 3.1 微/纳流控芯片中多尺度问题的国外研究现状

由于生物化学芯片实验室的出现<sup>[2][2]</sup>,微小通道中流体流动已经成为一个热门的研究方向<sup>[10, 11][10][11]</sup>。早期 Manz 等人对微型化概念的理论研究表明,电渗泵吸  $\mu$ TAS 中移动水溶液介质通过相互连接的通道的一种诱人 and 可行的方案,尤其是在需要分离时<sup>[2][2]</sup>。

O'Connell 和 Thompson<sup>[12][12]</sup>于1995年提出了一种算法用于耦合流体系统中的分子动力学模拟和连续介质力学计算,耦合算法对分子动力学—连续介质界面附近的流体分子动力学施加了约束,通过界面区域的通量交换达到两个模拟区域的耦合,这一方法极大地扩展了分子动力学模拟可达到的尺度。

Delgado-Buscalioni和Coveney<sup>[13, 14][13][14]</sup>运用连续介质—粒子杂化耦合模拟,并提出了双向耦合方案(two-way coupling),研究了非稳态流体流动中质量、动量和能量传递情况。流体内部区域(P区域)的原子水平的描述与外部区域(C区域)的连续介质流体力学描述相耦合,二者的匹配通过界面重叠区域的通量交换达到。

O'Connell等人 and Delgado-Buscalioni等人所提出的耦合方法称作直接通量交换法(direct flux exchange, DFX)。Hadjiconstantinou<sup>[15][15]</sup>于1999年发表的论文中提出了另外一种混合模拟方法,可以称作区域分解方法。据 Hadjiconstantinou, DFX方法没有对时间尺度解耦,对于某个简单问题的求解DFX方法要比作者提出的算法慢约100倍。Hadjiconstantinou的方法通常成为舒瓦茨交替法(Schwarz alternating method)。

多尺度模拟方法已经被用于具有局部分子特征的流体流动的研究<sup>[16, 17]</sup>。[16][17] Aktas 和 Aluru<sup>[18][18]</sup>应用连续介质力学—DSMC (direct simulation Monte Carlo)方法于微流体过滤器的粒子捕获和分类的多尺度分析。Qian和Aluru<sup>[19–22][19][20][21][22]</sup>于2002年提出了嵌入多尺度模拟方法用于分析纳米通道中的电渗流,相较于直接的分子动力学模拟,嵌入多尺度方法在结果上基本和直接分子动力学模拟的结果一致,作者利用局部区域(电双层区域)的分子动力学模拟结果中的流体速度分布,修改了通道中其它区域的连续介质力学模拟的参数与边界,得到了纳米通道中电渗流的速度分布、粒子分布和电势分布。多尺度模拟的结果和直接分子动力学模拟的结果进行了比较,表明经典连续介质理论明显高估了高本底溶液浓度中的电渗流平均速度。Werder等人<sup>[23][23]</sup>于2005年提出了一种基于分子动力学—连续NS方程求解器的有限体积离散。两个区域通过舒瓦茨交替法交换信息,他

们使用这一杂化方法研究液氩在碳纳米管中的流动,发现得到的流场与完全分子动力学得到的参考流场一致。

Joseph等人<sup>[24]</sup>[24]提出了一种分层多尺度方法用于求解纳米通道中离子输运问题,说明了量子计算得到的偏电荷(partial charges)显著影响了狭长结构中电解质的输运性质。作者采用了这种方法考虑了量子效应,通过首先利用密度泛函理论(DFT)计算原子便电荷,然后将其作为输入用于分子动力学模拟来计算扩散系数和迁移率,最后使用这些值利用Poisson–Nernst–Planck方程来计算电流–电压特征。流道壁–电解质的相互作用在通道宽度为1~2nm数量级上时。由于粒子密度的波动在非加电通道中观察到了电渗流,因为波动产生了局部净电荷密度。

Yasuda、Donev等小组提出了事件驱动(event-driven)的杂化分子动力学和DSMC模拟方法<sup>[25]</sup>[25]以及分子动力学与CFD的耦合模型<sup>[26]</sup>[26]等。

### 3.2 微/纳流控芯片中多尺度问题的国内研究现状

20世纪90年代后期美国在微全分析领域做了很大投入,并取得了相当多的研究成果,而我国是从21世纪初才开始投入较大的人力财力资源从事这项研究的。国内的一些大学和研究所也开始了微流控分析这方面的研究工作,并且取得了一定的成就<sup>[27]</sup>[27]。然而,国内对于材料设计及性能预测中多尺度问题<sup>[28–31]</sup> [28] [29] [30] [31]和微流体/纳流体中多尺度流动问题的研究国内才刚刚起步<sup>[32]</sup>[32]。

国内Nie和Liu等人<sup>[33, 34]</sup>[33][34]2004年对DFX方法进行了拓展,利用连续Navier-Stokes(NS)方程求解一部分流动区域,而使用分子动力学模拟求解另一部分区域,二者耦合通过重叠区域的约束动力学求解,并将此方法用于模拟突然启动的Couette流和通道壁粗糙的纳米尺度流动,结果显示求解结果和解析解和完全分子动力学模拟结果一致。国内Cui等人<sup>[35]</sup>[35]2006年发表的论文中使用的方法和Nie<sup>[33]</sup>[33]等人使用的类似,但是Cui等人在进行约束粒子动力学模拟时使用了一个虚拟的阻尼力和一个虚拟的附加惯性力,并使用此方法进行了突然启动的边界条件为分别为非滑移和滑移条件的模拟来验证此混合算法,而且和非滑移边界的解析解和滑移边界条件的完全分子动力学模拟结果进行了比较。但是,Nie和Cui的拓展了的方法在结果上相较于O’Connell等人和Delgado-Buscalioni等人所提出的耦合方法并没有多少改进。

最近,Wang和He<sup>[36]</sup>[36]于2007年发表的论文中提出了一种用于微流体/纳流体的混合原子—连续介质计算的动态耦合模型,此算法和以前的混合算法不同之处在于,以前的混合算法耦合部分的约束粒子动力学采用了经验耦合参数,Wang提出的新型耦合算法采用动态耦合模型,耦合参数在计算过程中动态计算,作者使用此算法进行了Couette流和Stokes流的模拟并和分子动力学模拟和NS方程的解进行了比较,得到了比较满意的结

果。

2007年张小华等人<sup>[37]</sup>[37]提出了一种新的计算聚物流体的多尺度方法，在宏观尺度上应用无网格方法求解速度场，在微观尺度上应用随即模拟技术计算聚合物对应力的贡献，避免需要本构方程来封闭连续性方程和动量守恒方程。



## 第 4 章 研究内容和创新及技术路线

### 4.1 研究内容

- 1.在现今模型下，构建微/纳流控中多尺度现象模拟的通用理论框架[38] [39] [40] [41] [42] [43] [44] [45] [46] [47] [48] [49]；
- 2.构建区域分解方法(舒瓦茨交替法)的电渗流模拟模型；
- 3.利用多尺度模拟研究微/纳较复杂结构通道中电渗流动[50]；
- 4.利用多尺度模拟研究级联电渗泵[51] [52] 流体流动[53]，与连续性方程进行耦合求解全通道流体分布；
- 5.统一耦合框架在聚合物多尺度流动中的可能应用[54]。

### 4.2 创新点

尝试在前人的基础搭建微/纳流控多尺度现象模拟的通用理论框架，并将其引入电渗流动模拟中；级联电渗泵的模拟通常使用连续介质力学理论(有限元求解)，本研究尝试将原子模拟方法与连续介质力学模拟耦合，充分利用商用模拟软件的优势(Comsol)。

### 4.3 技术路线

将利用Hadjiconstantinou[15]提出的区域分解算法搭建着重应用于电渗流动的多尺度模拟方案，细粒度使用分子动力学模拟，粗粒度使用Comsol的Femlab多物理场模拟软件进行连续介质模拟，界面区域信息交换同时进行时间尺度解耦。分子动力学，Comsol Femlab 3.4，Ns方程，Pb方程，

## 第 5 章 计划进度

2007.10 – 2008.5	完成文献综述和开题报告
2008.5 – 2008.7	完成电渗流多尺度模拟的理论构建和初步模型验证， 同时开始写毕业论文
2008.7 – 2008.10	完成模型验证，并进行多种条件下电渗流(泵)的仿真模拟， 实验数据处理，制表，论文书写
2008.10 – 2008.12	完成所有仿真对象的模拟，并计划完成毕业论文的初稿
2008.12 – 2009.3	完成论文修改
2009.3 – 2009.5	准备答辩、答辩

## 参考文献

- [1] 修武, 施冠丞, 许坤霖. 微流道系统内流体流动现象之数值模拟. 台大工程学刊, 2002. 86:73–82.
- [2] A. Manz, N. Graber, H. M. Widmer. *Miniaturized total chemical analysis systems: A novel concept for chemical sensing*. Sens. Actuators B, 1990. 1:244–248.
- [3] D. J. Harrison, K. Fluri, K. Seiler, Z. Fan, C. S. Effenhauser, A. Manz. *Micromachining a miniaturized capillary electrophoresis-based chemical analysis system on a chip*. Science, 1993. 261:895–897.
- [4] D. R. Reyes, D. Iossifidis, P. A. Auroux, A. Manz. *Micro total analysis systems: 1. introduction, theory, and technology*. Anal. Chem., 2002. 74:2626–2636.
- [5] P. A. Auroux, D. Iossifidis, D. R. Reyes, A. Manz. *Micro total analysis systems: 2. analytical standard operations and applications*. Anal. Chem., 2002. 74:2637–2652.
- [6] D. Erickson, D. Li, U. J. Krullb. *Modeling of dna hybridization kinetics for spatially resolved biochips*. Anal. Biochem., 2003. 317:186–200.
- [7] NNCO. *Nanotechnology and the environment*. Technical report, the National Nanotechnology Initiative Workshop, 2003.
- [8] G. Hu, D. Li. *Multiscale phenomena in microfluidics and nanofluidics*. Chem. Eng. Sci., 2007. 62:3443–3454.
- [9] J. Hahm. *Numerical simulation of electrokinetically driven micro flows*. Ph.D. thesis, Texas A&M University, 2005.
- [10] G. Karniadakis, A. Beskok, N. Aluru. *Microflows and Nanoflows: Fundamentals and Simulation*. Springer, 2005.
- [11] D. Erickson, D. Li. *Integrated microfluidic devices*. Anal. Chim. Acta., 2004. 507:11–26.
- [12] S. T. O’Connell, P. A. Thompson. *Molecular dynamics-continuum hybrid com-*

- putations: a tool for studying complex fluid flow.* Phys. Rev. E, 1995. 52:5792–5795.
- [13] R. Delgado-Buscalioni, P. V. Coveney. *Continuum-particle hybrid coupling for mass, momentum, and energy transfers in unsteady fluid flow.* Phys. Rev. E, 2003. 67:046704.
- [14] R. Delgado-Buscalioni, P. V. Coveney. *Hybrid molecular–continuum fluid dynamics.* Unpublished.
- [15] N. G. Hadjiconstantinou. *Hybrid atomistic–continuum formulations and the moving contact–line problem.* J. Comput. Phys., 1999. 154:245–265.
- [16] W. Ren, W. E. *Heterogeneous multiscale method for the modeling of complex fluids and micro-fluidics.* J. Comput. Phys., 2005. 204:1–26.
- [17] K. A. Fichthorn, Y. Qin. *Molecular dynamics simulation of the forces between colloidal nanoparticles in lennard–jones and n-decane solvent.* Granular Matter, 2008. 10:105–111.
- [18] O. Aktas, N. R. Aluru. *A combined continuum/dsmc technique for multiscale analysis of microfluidic filters.* J. Comput. Phys., 2002. 178:342–372.
- [19] R. Qiao, N. R. Aluru. *Ion concentrations and velocity profiles in nanochannel electroosmotic flows.* J. Chem. Phys., 2002. 8:4692–4701.
- [20] R. Qiao, N. R. Aluru. *Multiscale simulation of electroosmotic transport using embedding techniques.* Int. J. Mutliscale Comput. Eng., 2004. 2:173–188.
- [21] J. B. Freund. *Atomistic simulation of electro-osmosis in a nanometer-scale channel.* In *Proceedings of the Summer Program 2000.* Center for Turbulence Research, 2000 .
- [22] J. B. Freund. *Electro-osmosis in a nanometer-scale channel studied by atomistic simulation.* J. Chem. Phys, 2002. 116:2194–2200.
- [23] T. Werder, J. H. Walther, P. Koumoutsakos. *Hybrid atomistic–continuum method for the simulation of dense fluid flows.* J. Comput. Phys, 2005. 205:373–390.
- [24] S. Joseph, A. N. Chatterjee, N. R. Aluru. *Multiscale computation.of fluid.and.ion*

- transport in nanochannels: The effect of partial charges*. Nanotech, 2005. 1:601–604.
- [25] S. Yasuda, R. Yamamoto. *A model for hybrid simulations of molecular dynamics and cfd*. (unpublished).
- [26] A. Donev, A. L. Garcia, B. J. Alder. *An event-driven hybrid molecular dynamics and direct simulation monte carlo algorithm*.
- [27] 张鹏. 微流控芯片中多物理场耦合问题的数值模拟研究. Ph.D. thesis, 吉林大学, 2006.
- [28] 王崇愚. 多尺度模型及相关分析方法. 复杂系统与复杂性科学, 2004. 1:9–19.
- [29] 何国威, 夏蒙芬, 柯孚久, 白以龙. 多尺度耦合现象: 挑战和机遇. 自然科学进展, 2004. 14:121–124.
- [30] 柴立和. 多尺度科学的研究进展. 化学进展, 2005. 17:187–190.
- [31] 周震, 言天英, 高学平. 储能材料的模拟与设计. 物理化学学报, 2006. 22:1168–1174.
- [32] 葛蔚, 麻景森, 张家元, 唐德翔, 陈飞国, 王小伟, 郭力, 李静海. 复杂流动多尺度模拟中的粒子方法. 科学通报, 2005. 50:841–853.
- [33] X. Nie, S. Chen, W. N. E, M. O. Robbins. *A continuum and molecular dynamics hybrid method for micro- and nano-fluid flow*. J. Fluid. Mech., 2004. 500:55–64.
- [34] J. Liu, S. Chen, X. Nie, M. O. Robbins. *A continuum-atomistic simulation of heat transfer in micro- and nano-flows*. J. Comput. Phys., 2007. 227:279–291.
- [35] J. Cui, G. He, D. Qi. *A constrained particle dynamics for continuum-particle hybrid method in micro- and nano-fluidics*. Acta. Mech. Sinica., 2006. 22:503–508.
- [36] Y. Wang, G. He. *A dynamic coupling model for hybrid atomistic-continuum computations*. Chem. Eng. Sci., 2007. 62:3574–3579.
- [37] 张小华, 欧阳洁, 孔倩. 聚合物流动的多尺度模拟. 化工学报, 2007. 58:1897–1904.