

微纳流动和电池的 多尺度模拟研究

于影 著

非外借



上海交通大学出版社
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS

微纳流动和电池的 多尺度模拟研究

于 影 著



上海交通大学出版社
SHANGHAI JIAO TONG UNIVERSITY PRESS

内容提要

本书基于连续-粒子耦合算法、分子动力学、耗散粒子动力学与有限元等宏观模拟方法，建立了适用于微纳流领域的多尺度模拟方法，同时基于参数传递方法建立了适用于电池多尺度模拟方法。不仅对微流控和电池多尺度现象的分子水平的认识具有学术价值，还为微流控系统和电池多尺度设计软件的开发奠定了坚实的基础。

本书针对仿真计算的相关从业人员，对微纳流和电池流体流动规律分子水平的认识以及微纳流控芯片的设计和新型电池的开发具有重要意义。

图书在版编目(CIP)数据

微纳流动和电池的多尺度模拟研究 / 于影著. -- 上

海 : 上海交通大学出版社, 2019

ISBN 978-7-313-21373-0

I . ①微… II . ①于… III . ①纳米材料-应用-电池-研究 IV . ① TM911

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2019) 第 110010 号

微纳流动和电池的多尺度模拟研究

著 者：于 影

出版发行：上海交通大学出版社

邮政编码：200030

印 制：定州启航印刷有限公司

开 本：710mm×1000mm 1/16

字 数：162 千字

版 次：2019 年 11 月第 1 版

书 号：ISBN 978-7-313-21373-0

定 价：49.00 元

地 址：上海市番禺路 951 号

电 话：021-64071208

经 销：全国新华书店

印 张：11.5

印 次：2019 年 11 月第 1 次印刷

版权所有 侵权必究

告读者：如发现本书有印装质量问题请与印刷厂质量科联系

联系电话：0311-66567747

前言

本书得到了国家自然科学基金项目的资助，属于该项目多尺度模拟部分的研究内容之一。

微纳流控系统在国防、医学、生物工程等领域得到了广泛应用。但是，微纳流控系统内的复杂流动现象属于多尺度现象，传统的计算流体动力学并不适用于解决多尺度问题，因此，亟待发展多尺度计算机模拟方法研究微纳流道内的复杂流动现象。此外，针对现有动力电池充电时间长、能量密度低、存在安全隐患等问题，铝空气电池由于其能量密度高、价格低廉、无毒环保等优点成为研究热点。微纳流动中库特流和微流控电池的扩散流等领域的多尺度现象受到广泛关注。本书研究微纳流和电池的多尺度模拟方法，研究成果不仅对微流控和电池多尺度现象的分子水平的认识具有学术价值，还为微流控系统和电池多尺度设计软件的开发奠定了坚实的基础，对其他领域的多尺度模拟也具有参考价值。

本书的主要研究内容包括：

(1) 基于连续-粒子耦合算法模拟微流道中的库特流动问题。采用连续-分子动力学算法分析讨论连续区→粒子区域内不同的网格疏密程度对流体粒子速度及密度的影响，并研究由振动引起的纳米通道壁附近的流体性质变化；采用连续-耗散粒子动力学方法模拟稳态流动问题，应用 Schwarz 交替方法对模拟区域进行空间解耦，并分析研究连续区→粒子区域网格大小及剪切率对流体流动特性的影响。

(2) 采用粗粒化分子动力学方法研究柱状纳米通道中接枝聚合物电解质刷及其构象变化的特性，研究接枝于平板流道表面的中性瓶型聚合物构象变化的

情况,提出聚合物刷修饰流道表面的纳流的多尺度模拟方法。在微观尺度采用分子动力学方法计算聚合物刷修饰流道内壁面的滑移长度,并将滑移长度代入宏观流动计算,分析不同剪切率和聚合物接枝数量对流体流动的影响。

(3) 建立微流控燃料电池分层多尺度模拟模型,以钒离子扩散系数作为传递信息,在微观尺度计算钒离子的扩散系数,并将该结果代入介观尺度中,计算钒离子在多孔介质中的有效扩散系数;在宏观尺度中,将微观和介观尺度中的计算结果代入控制方程,通过流体动力学计算电池的宏观性能。与实验结果对比,其计算精度要高于单一尺度的宏观模拟结果。

(4) 建立锂空气电池的多尺度模型,在微观尺度计算空气中氧气在多孔介质中的有效扩散系数,分别讨论温度和多孔介质孔径对有效扩散系数的影响。在宏观尺度中,将微观尺度计算而得到的有效扩散系数代入控制方程,进而计算锂空气电池的宏观性能。与文献的实验结果对比,预测的充放电曲线的趋势一致。

(5) 提出一种电解质溶液导电率的多尺度模拟方法。在微观尺度采用全原子分子动力学模拟,计算 KOH 溶液内各组分粒子的径向分布函数,得到带离子均方位移和扩散系数,代入宏观尺度 Nernst-Einstein 方程,求得 KOH 电解质溶液的电导率。在针对铝空气电池的研究中,采用多尺度方法研究碱性电解质溶液的电导率与溶液质量分数的关系,优化 KOH 溶液质量分数,使其电导率达到最佳值。分别采用纯铝、铝合金 Al7475 和 Al2024 作为电池的金属阳极,实验测试铝空气电池的放电性能。此外,本书还设计了一种可分离式铝空气电池方案,可以有效抑制铝空气电池在搁置时的自腐蚀放电,减少析氢反应。同时,以 Al7475 作为电池阳极为例,通过间歇式放电实验证实,可分离式铝空气电池可以有效保护电池的可用容量,提高金属阳极的使用效率。

本书对比研究了连续-粒子耦合算法、分子动力学、耗散粒子动力学与有限元等宏观模拟方法结合的多尺度模拟在微纳流领域的应用,还研究了电池多尺度模拟的参数传递方法。本书对微纳流和电池流体流动规律分子水平的认识以及微纳流控芯片的设计和新型电池的开发具有重要意义。

目 录

第 1 章 绪论 / 001

- 1.1 选题背景及研究意义 / 002
- 1.2 国内外研究现状 / 007
- 1.3 主要研究内容 / 020

第 2 章 微纳流动的多尺度模拟 / 023

- 2.1 微纳流动的分子动力学 - 连续耦合模拟 / 024
- 2.2 微纳流动的耗散粒子动力学 - 连续耦合模拟 / 046
- 2.3 微纳流体振动流动的分子动力学 - 连续耦合模拟 / 055
- 2.4 本章小结 / 062

第 3 章 聚合物刷纳米通道的多尺度模拟 / 065

- 3.1 聚合物电解质刷对纳米通道的影响 / 066
- 3.2 中性瓶型聚合物对纳米通道的影响 / 078
- 3.3 聚合物刷修饰的微纳流道内流体流动的多尺度模拟 / 087
- 3.4 本章小结 / 091

第 4 章 微流控多孔燃料电池的多尺度模拟 / 093

- 4.1 多尺度计算模型 / 094
- 4.2 全钒微流控燃料电池的多尺度计算与实验拟合 / 104
- 4.3 本章小结 / 111



第 5 章 金属空气电池的多尺度模拟及实验研究 / 113

5.1 锂空气电池的多尺度模拟研究 / 114

5.2 铝空气电池电解质溶液导电率的多尺度模拟研究 / 123

5.3 聚合物凝胶铝空气电池的制备方法 / 137

5.4 分离式铝空气凝胶电池的设计方案 / 144

5.5 本章小结 / 146

第 6 章 全书总结 / 149

6.1 研究工作总结 / 150

6.2 创新点 / 153

6.3 后续工作展望 / 153

参考文献 / 155

索引 / 176



第 1 章 绪 论



1.1 选题背景及研究意义

本书得到了国家自然科学基金项目的资助，属于该项目多尺度模拟部分的研究内容之一。

随着电子设备的快速发展，高性能的储能设备是当今世界技术发展的大势所趋。电池最重要的性能指标是能量密度和功率密度，电池的成本、使用寿命、安全性及环境友好性都是评价电池性能的重要指标。现行主要的电池产品包括铅酸电池、锌锰电池、镍氢电池及镍镉电池，受制于较低的能量密度，这类电池很难满足大型设备的用电需求。

金属空气电池作为一种新型能量储备装置，使用空气中的氧气作为活性物质，理论能量密度高达 $5\,200\text{ W}\cdot\text{h/kg}$ ，并且具有安全性及环境友好的特性，其优异的性能使其发展潜力巨大。近几年，可解决电动车续航里程短这一技术难题的铝空气电池（Aluminum-air Battery）横空出世，具有划时代的意义^[1]。著名的日本住友电气工业株式会社（简称“住友电工”）也成功开发出一种新型的多孔铝材料，已经将电动车所用电池的容量增加了3倍^[2]。美铝加拿大公司和以色列 Phinergy 公司合作研究开发了一种具有超级续航能力的铝空气电池，铝空气电池电动车能连续行驶 19h，从多伦多开到 1 800 km 外的哈利法克斯，全程无须停车充电^[3]。在新闻报道的鼓舞下，我们课题组也尝试了铝空气电池的实验室研究^[4]，但遇到了工艺和配方等一系列实际困难。本书是在前期实验研究基础上，进一步从多尺度模拟的角度开展研究工作。我国已经明确将纯电驱动电动车作为车用动力的战略方向，由于锂离子电池等动力电池存在能量密度低、充电时间长、安全隐患大等一系列问题，目前的纯电动车仅能定用户、定用途、小范围推广，铝空气电池的研发对解决电动车的安全和持续行驶难题具有重要的现实意义。

电池系统本身的尺度极为复杂，以锂空气电池为例，空气中的氧气需要



通过多孔空气电极渗透到电池内部被还原,锂离子需要通过电解质回到负极生成金属锂,实现大容量充放电。在这一过程中,空气中氧气的渗透、金属锂离子在电解质溶液中的运动属于微观领域,电池的放电特性属于宏观领域。因此,电池系统实际上是复杂的多尺度系统,特别是微观领域流体的运动规律、带电粒子的扩散运动与电解质溶液的电导率密切相关。对于电池的研究,需要从多尺度角度把握,其宏观研究成果较多,但微观领域研究较少,亟须从微观尺度深入了解电池系统中氧气的扩散、带电离子的扩散、微流体的运动规律等问题。

近 30 多年来,随着微纳流控系统和微纳机电系统的商业化应用,微纳流动中 Couette 流^[5]以及微流控电池的扩散流^[6]等研究日益得到重视。微纳流控系统内的复杂流动属于多尺度现象^[7],传统的计算流体动力学不再适用,迫切需要发展多尺度计算机模拟方法。

微纳机电系统 (Microelectromechanical Systems, MEMS) 是指特征尺度小于 1 mm、大于 1 nm 并结合了电子和机械组件的装置^[8]。微纳机电系统不仅可完成宏观尺度机电系统所不能完成的任务,也可嵌入常规尺度系统中,把机械装备的智能化和可靠性提高到一个新的水平。MEMS 已在国防、医学、生物工程、化学分析和医疗健康等领域获得了重要应用。随着 MEMS 技术的发展,生化分析设备的微型化和集成化渐渐成为研究的热点,被称为“微全分析系统”(Micro Total Analysis Systems, μ TAS)。微流控芯片系统 (Microfluidic Chip Systems) 包含在 μ TAS 中,也称为“建在芯片上的实验室”,被认为是一种最具发展潜力的微型分析平台^[9,10]。在微流控芯片系统中,化学合成、反应和分析几乎都涉及微纳流体的流动,因此芯片的设计不得不考虑微纳流体的流动特征。在微流控芯片系统中,流体呈现出一些与宏观流动不同的现象,如固液界面出现明显的滑移现象^[11],表面力的作用渐渐超过体积力,黏性耗散开始主导微流体中的质量传输(低 Reynolds 数流动)等,因此微纳尺度下的流动问题不能简单地用宏观尺度下的方法解决。微纳流控系统不仅可以使珍贵的生物试样与试剂消

耗大大降低，还可以使分析速度大大提高，费用大大下降。微全分析系统以微管道网络为结构特征，可对微量流体进行采样、稀释、反应、分离、检测等复杂且精确的操作，因而有广泛的应用前景，如可用于稀有细胞的筛选、信息核糖核酸的提取和纯化、基因测序、单细胞分析、蛋白质结晶、药物检测等。微流体的流动是非常复杂的，而且其中的一些问题凭借当前的实验条件是无法解决的，即使可以用实验观测某些现象，也难免引入许多不必要的干扰因素，甚至一些物理上的相同现象由于来自不同实验者而得出了截然不同的结果，这使我们对实验的准确性产生了怀疑。解决这个问题一个可行的途径是通过计算机模拟真实的物理过程。由于计算机模拟可以人为地选择任意精确的外界条件来控制模拟过程，这就使我们可以有针对性地模拟任何一个对实验起关键作用的参数，这是实验所无法做到的。同时，选择计算机模拟的另一个更为关键的原因是实验的成本问题，许多微流动实验的成本比较高，有些甚至很多实验室都无法承担，因此计算机模拟成为其唯一的选择。实验、理论和计算机模拟是当前进行科学研究的三种不同手段。在微流体现象的研究过程中，实验是非常重要的，因为一些新的现象和一些有实用价值的微流体芯片必须通过实验来发现和验证。但是，一个学科和领域的建立与完善需要其有坚实的理论基础，在微流体流动这一领域实验上的进展要比理论快得多。许多新的流动现象至今尚无合理的理论解释，这也造成了针对相同现象的不同理论解释。如何判断哪种解释更合理、更有普遍意义呢？就当前来说，最好的办法就是通过计算机模拟来验证。

微流控芯片和电池都是一个存在多物理场耦合的复杂系统，不仅涉及流体流动问题，还包含结构力学、电磁学、热传导、化学反应和生物等方面的问题。从理论上来分析这些耦合问题，就意味着需要求出一组微分方程的解析解。这显然是不实际的，因为对许多非线性的偏微分方程至今也没有得到解析解。对于某些问题，我们可能将相对应的非线性偏微分方程做线性化处理，如对在微流动中起重要作用的 NS (Navier-Stokes) 方程，考虑到某些微流动的低 Reynolds 数特性，可以忽略其中的非线性项得到 Stokes 方程或



将非线性项线性化得到 Oseen 方程, 进而求出这些线性偏微分方程的解析解, 但这也仅限于极少数几何结构简单的问题。对于那些已经求得解析解的问题, 如何判断这种通过线性化处理得到的解析解是否可以正确地描述相应的微流动现象呢? 最简单的方法就是通过数值方法求解 NS 方程, 并用得到的数值解来验证。就像大多数工业化产业一样, 如汽车、电子、航天航空等, 在产品设计和开发的初期阶段, 一般都要采用相应的软件进行产品正式生产前的设计和分析, 以便预测和优化新产品的性能。

同样, 在微流控芯片和电池的发展过程中, 也会渐渐出现一些稳定而且标准化的设计和分析软件。这些软件的开发依赖多方面的因素, 与微流体模拟相关的流体模型和数值算法的创建与改进是其中最为重要的组成部分。大多数宏观流体的流动状态可以用一组偏微分方程来描述, 即 NS 方程。但 NS 方程是基于三个基本假设建立起来的: ①满足牛顿力学; ②满足连续性假设; ③不能偏离热力学平衡太远。第一个假设条件规定了 NS 方程适用的范围, 也就是说不能用 NS 方程描述量子力学和相对论力学框架下的流动状态。在 NS 方程中, 质量和能量是各自守恒的, 两者不存在互相转换, 动量的变化率等于作用在对应流体微元上的合力。第二个假设条件要求空间是无限可分的, 即对任意的流体微元而言, 要求流体微元在微观上足够大, 以至于其中含有大量的分子数, 足以消除分子的热运动噪声, 同时要求宏观上足够小, 小到与宏观的特征尺度相比, 可以把它看成一个流体质点。第三个假设条件也可以称为准平衡假设, 该条件要求应力与应变率之间、热通量与温度梯度之间满足线性关系, 这两个条件分别是针对牛顿流体和满足傅里叶定律的流体而言的。准平衡假设要求在一个与流动特征时间相比足够小的时间内, 有足够多的分子发生碰撞, 同时要求在这一足够小的时间内, 分子移动与流动特征尺度相比足够小的距离。这三个假设如果有任何一个不满足, 就要考虑采用其他流动模型。在微流控和电池模拟中, 随着尺度的缩小, 上面提到的假设条件可能会不再成立。在这种条件下可能会出现非平衡流动, 导致 NS 方程不再能描述这种条件下的流动, 同时流动不再是非



滑移流动。对于空气电池的气体而言，可以通过 Knudsen Number (Kn) 判断 NS 方程的适用范围，Knudsen Number 表示平均自由程和流动特征长度之比。NS 方程仅在 $Kn > 0.1$ 的范围内有效，如果还要求满足非滑移边界条件， Kn 的范围将变成 $Kn > 0.001$ 。当 Kn 超过 0.1 以后，NS 方程不再有效，可以用更高阶的方程代替 NS 方程。最后，如果连续性假设也失效，就必须采用基于分子模型的方法了。对于稀薄气体，可以采用求解 Boltzmann 方程的数值方法，如直接模拟蒙特卡罗法 (DSMC) 进行求解；对于高密度气体，可以采用分子动力学方法解决问题。对于微流控系统的液体而言，也面临着与气体同样的问题，但是液体分子有非常高的碰撞率，以至于通过平均自由程和 Knudsen Number 判断 NS 方程的适用范围不再有效。也就是说，无法通过 Knudsen Number 判断 NS 方程和非滑移边界条件在什么情况下失效。在这种情况下，就需要采用更加精细的流体模型来判断 NS 方程是否有效，但是流体并没有像稀薄气体那样基于分子的运动学理论，因此分子动力学成为模拟流体的首要选择。

从上面的分析可以看出，在微流动和电池模拟过程中，无论气体还是液体采用宏观的流体模型都有可能失效。因此，在微流体和电池模拟中引入多尺度算法有其必要性。

在大多数微流动和电池模拟中，连续假设失效仅限制在有限的区域内，如流固界面和流流界面，因此，比较合理的模拟方法是在连续假设不成立的区域采用基于分子模型的模拟方法，在其他区域采用基于连续模型的模拟方法。可以看出，连续流动决定分子尺度流动的边界条件，同时，分子尺度流动又反过来通过修改连续流动的边界条件来影响连续流动。这样做既可以保证仿真的有效性，又可以在很大程度上节省时间。从大量研究微流体的文献可以看出，与微流体相关的模拟算法是非常多的，造成这种现象的一个不可忽视的原因是微流体流动的多尺度性。考虑到这种多尺度性，有人或许会问：在当前的计算条件下，是否存在一个适合所有尺度的模拟算法呢？显然是不存在的。也就是说，这些算法中没有一个是万能的，所

以, 解决微流动问题的一个比较好的方案就是在不同尺度上采用最适合该尺度的算法。例如, 在电动微流体系统中, 双电层的厚度一般在 10 nm 的量级, 却对整个系统有着关键性的影响, 而大部分微流系统的尺度远大于这个量级。为了模拟这样的系统, 如果在整个区域采用相当于 10 nm 量级上的模拟算法, 显然是不实际的, 而且在双电层外面没有必要采用这样高精度的模拟算法。因而, 在保证计算正确的前提下, 对许多问题来说, 如果对整个系统采用同样的模拟方法, 而不考虑系统的多尺度性, 必将造成计算时间上的浪费或者根本就不可能完成计算任务。聚合物刷可以显著地改变流道的表面性质, 使实验研究或理论研究聚合物接枝的纳米通道内的流动非常困难, 因此分子模拟方法成了唯一的研究手段。

本书将研究微纳流和电池模拟的多尺度方法, 对微纳流和电池流体流动规律的分子水平的认识可指导微纳流控芯片的设计和新型电池的开发。多尺度模拟方法的研究成果也具有普适性, 具有重要的理论意义和学术价值。

1.2 国内外研究现状

1.2.1 多尺度模拟方法的研究现状

多尺度模拟方法最先应用在固体上^[12,13], 不但应用范围较广, 而且理论比较完善, 出现了许多有价值的多尺度算法, 如 FEAt 方法、QC (Quasicontinuum) 方法^[14]、MAAD (Macro Atomistic Ab Initio Dynamics) 方法^[15]等。主要原因是固体中原子被限制在晶格点附近的位置上, 这种特性使原子与连续区域的信息交换相对容易。相反, 在流体多尺度模拟中的任何一个原子在一定的时间内可以运动到流体区域的任何位置, 不能再利用原子与位置间的相关性了, 在将宏观量施加在原子区域的边界上时, 就不能明确地定义和重构原子间的相互作用状态, 因此流体的多尺度算法研究要

比固体困难。对于流体来讲，最初的耦合算法主要集中在稀薄气体领域，主要原因是在稀薄气体的耦合模拟中边界条件的施加要比高密度流体（高密度气体和液体）容易得多。

在流体多尺度模拟过程中，最重要的两个问题是耦合算法的选择和分子区域上边界条件的施加。不同流体的流动状态都有其各自不同的物理特性，在建立多尺度模拟耦合算法时充分考虑这些物理特性是必要的，这样可以使算法更加高效和合理。稀薄气体和高密度流体在耦合算法的构造上存在一定的差异。在稀薄气体的模拟中，分子区域的模拟普遍采用 DSMC 方法模拟，由于在 DSMC 模拟中不必考虑分子间是否会重叠，这为分子区域边界条件的施加提供了很大的方便。在稀薄气体的模拟中，分子动力学要求原子之间不能重叠，否则会造成不可预期的后果，所以在施加分子区域的边界条件时，必须考虑粒子的插入位置和插入位置对系统能量的影响。耦合算法中另一个值得注意的地方是分子和连续区域共同边界的选择，耦合算法的目的是在保证得到合理解的前提下，尽可能减少计算时间。一般来讲，我们总是希望分子仿真区域尽可能小，因此寻找一个判断准则来预测连续方法最先失效的边界位置就成了我们所关心的问题。稀薄气体的模拟已经有比较好的方法来判断这样的边界位置，但是对高密度流体并没有什么有效的方法。当前针对高密度流体的耦合算法研究大多集中在对耦合算法本身的研究，应用也主要集中在一些简单的几何结构上。与此不同的是，稀薄气体的耦合算法却得到了比较广泛的应用。高密度流体耦合算法无论从构造还是实现上都要比稀薄气体模拟复杂。

多尺度模拟方法可以归结为一类算法：连续 - 原子耦合算法^[16]。一般来讲，在原子区域可采用任何一种或几种粒子模型来描述，通常是分子动力学方法（Molecular Dynamics, MD）^[17]或耗散粒子动力学（Dissipative Particle Dynamics, DPD）^[18]，连续区域则采用宏观连续方程来描述。这类算法可以用图 1.1 表示。

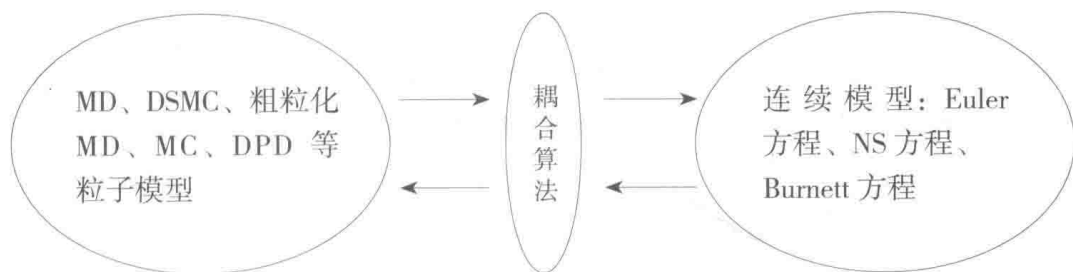


图 1.1 连续 - 原子耦合算法示意

注：箭头方向代表数据交换的方向。

连续 - 原子耦合算法中，为了在连续和原子区域的边界进行信息交换，通常的做法是在两个区域的共同边界上设置重叠区域。重叠区域可以根据耦合算法的不同划分为不同功能的若干层^[19]。如图 1.2 所示，重叠区域一般包含三层，即 $P \rightarrow C$ 层、缓冲层和 $C \rightarrow P$ 层。 $P \rightarrow C$ 层为粒子区域 ($\tilde{P}$) 向连续区域 (C) 传递信息的边界层；缓冲层夹在 $P \rightarrow C$ 层和 $C \rightarrow P$ 层之间； $C \rightarrow P$ 层为连续区域向粒子区域传递信息的边界层。在这三层中， $C \rightarrow P$ 层是整个算法实现的核心。

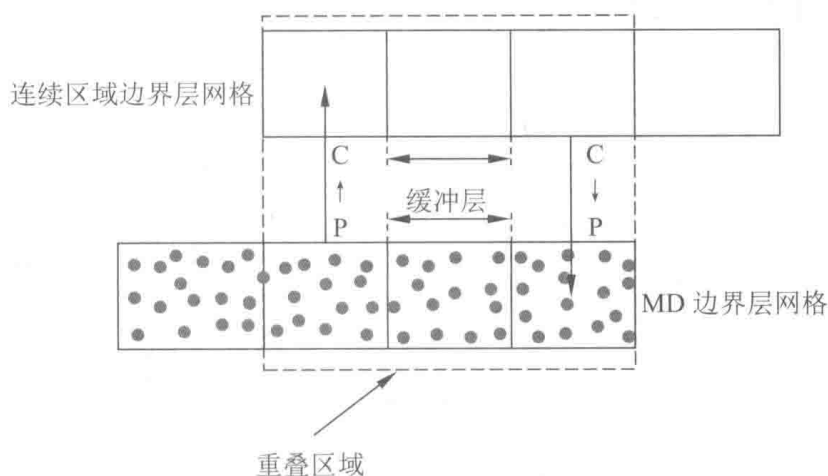


图 1.2 重叠区域的主要组成部分

除了上面提到的连续 - 原子耦合算法外，还有一类常用的耦合算法，即

粒子-粒子耦合算法^[20]，这种算法在两个不同的区域都采用粒子模拟算法，常用来模拟介观尺度下的流体流动。通常情况下，在需要精细模拟的区域一般采用 MD，在其他区域则采用粗粒化的流体模型，如 MC (Monte Carlo)、粗粒化的 MD 和 DPD 等。与单独采用 MD 模拟相比，这个耦合算法可以在很大程度上减少计算量，而且得到的结果与 MD 相吻合。该方法在 MD 与 MC 的结合位置依然采用重叠区域传递信息（如图 1.3 所示），被填充的圆圈表示 MD 粒子，空心圆圈表示 MC 粒子，中间的阴影区域表示 MD 与 MC 区域的耦合界面。从 MD 到 MC 的信息传递很直接，可以将来自 MD 区域的粒子直接精确地插入 MC 区域，而相反的过程比较难处理，如果直接将 MC 区域的粒子导入 MD 区域将会导致能量上的不守恒，所以该耦合算法采用了将 MC 区域的宏观属性传递给 MD 边界的处理方法，从而避免了上述情况的发生。

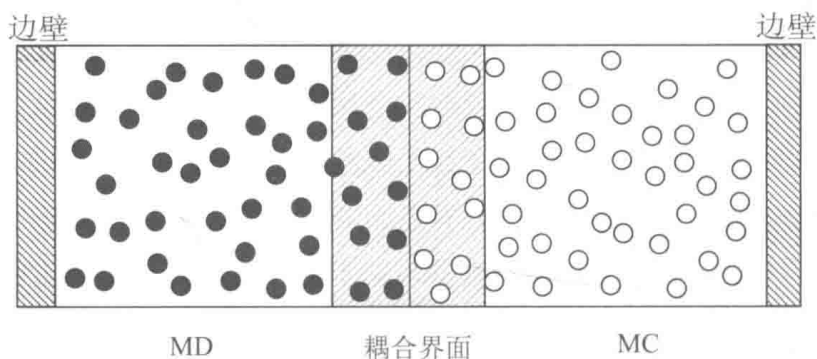


图 1.3 MD 和 MC 耦合算法示意

与上面的 MD 与 MC 的耦合模型不同，在耦合部分也可以不采用重叠区域而采用过渡区域来实现。在过渡区域中的分子可以动态地改变分子中的原子层次和介观层次所占的比重，可以将这种分子看成由原子组成的分子和对应的粗粒化分子线性组合的结果。两种不同粒子模型在线性组合中的比重与所在耦合区域中的位置相关。越靠近 MD 的边界，原子模型所占的比重就越大；反之，则粗粒化模型所占的比重就越大。在图 1.4 中用颜色的深浅来