

## 多肽在微通道内流动与迁移特性的数值模拟

朱桥辉<sup>1</sup>, 许少锋<sup>2</sup>, 陆俊杰<sup>2</sup>, 毛宇涛<sup>3</sup>, 王子恒<sup>3</sup>

(1. 浙江大学机械工程学院, 浙江 杭州 310027; 2. 浙大宁波理工学院机电与能源工程学院, 浙江 宁波 315100;  
3. 浙江理工大学机械与自动控制学院, 浙江 杭州 310018)

**摘要:** 利用耗散粒子动力学方法, 建立了多肽粗粒化模型, 分别研究了流场强度、多肽浓度、多肽链长、溶剂性质对多肽在微通道内压力驱动下流动行为的影响。研究发现, 多肽溶液表现出剪切稀化行为, 随流场强度增强, 壁面附近相对浓度降低; 随溶液浓度增加, 通道中心处流速增大, 多肽远离壁面的趋势增强; 随链长增加, 溶剂溶解能力降低, 多肽由壁面向通道中心迁移趋势增强。通过对不同条件下的流场与相对浓度分布进行分析, 提示不同条件对多肽在微通道流动与迁移特性具有重要影响, 并从流体动力学和流变学角度对多肽在不同条件下的流动与迁移机理给出了解释。

**关键词:** 微通道; 耗散粒子动力学; 数值模拟

**中图分类号:**

**文献标识码:** A

**文章编号:** 1000-7555(2022)11-000

微通道内的流场分布与迁移特性(横向迁移)是指高分子受限于通道宽度影响, 流体系统尺寸、溶剂性质、壁面条件等多个因素影响其在通道内的流速与迁移行为。微通道的通道宽度代表在两平行壁面之间的距离大小, 微通道内的横向迁移代表粒子在不同条件下沿通道宽度方向(垂直于壁面方向)所发生的运动。研究发现, 高分子溶液在压力流中, 剪切作用会使高分子链拉伸, 通道宽度方向上的剪切率分布不均匀, 中间处剪切率较小, 高分子链将迁移至通道中心, 布朗扩散与流体动力学作用也会导致高分子链发生横向迁移<sup>[1,2]</sup>。基于高分子迁移特性与流动行为的微流控技术被广泛应用于高分子微纳注塑和生物细胞分离、分选。多肽作为生物大分子的一种, 了解其在微通道内的流动特性, 有助于解释高分子链穿过生物膜通道<sup>[3]</sup>、人工肝中空纤维管内高分子链通过纤维膜微孔<sup>[4]</sup>等行为。

Fang等<sup>[5]</sup>通过显微技术研究了高分子在微通道内压力驱动流的流动行为, 发现通道宽度方向上高分子链由壁面向通道中心移动。Zheng和Yeung等<sup>[6]</sup>研究发现高分子链在毛细管内流动时会发生横向迁移, 其迁移方向取决于电场力的方向。

Pawlowaska等<sup>[7]</sup>实验发现水凝胶分子在振荡流场作用下通过微通道时, 会在微通道内发生横向迁移, 其迁移速度、构象变化受到分子所处初始位置、分子长度的影响。Wu和Li等<sup>[8]</sup>采用布朗动力学方法研究了高分子链在微通道内的延伸和断裂变化, 微通道内流场的剪切作用和通道收缩瓶颈处的伸长流作用共同决定了高分子链的性能变化与横向迁移变化。杨镇岳等<sup>[9]</sup>采用多粒子碰撞动力学与分子动力学相耦合的模拟方法研究了圆管内环形链的迁移行为, 结果表明, 环形链随着流场强度的增加向圆管中心迁移, 该现象是流体动力学相互作用导致而非剪切梯度。Palmer和Baardsen等<sup>[10]</sup>采用分子动力学方法研究了聚合物链在微通道内的横向迁移, 在壁的黏性相互作用下壁面附近处的聚合物浓度降低, 聚合物链向通道中心迁移。Xiang和Hajizadeh等<sup>[11]</sup>研究了应力梯度条件下聚合物在受限溶液中的迁移机理, 应力梯度所引起的迁移使得聚合物向通道中心迁移, 而由壁面作用引起的迁移导致壁面附近处聚合物浓度接近于0。Usta等<sup>[12]</sup>采用格子玻尔兹曼方法模拟了高分子溶液在微通道内的Couette流动与Poiseuille流动, 实验发现高分子链

会发生迁移行为,并且这种迁移行为与高分子链的构象、通道宽度密切相关。

以上研究可以看到,微通道内长链大分子的流动行为研究相对广泛但不够充分,特别是关于多肽的流动行为研究未得到开展,有待进一步深入。本文基于介观尺度下的耗散粒子动力学方法,对多肽在微通道内的流动行为进行数值模拟,分别探讨了流场强度、多肽浓度、多肽链长、溶剂性质等因素对多肽流动行为与迁移特性的影响。

## 1 模拟部分

### 1.1 耗散粒子动力学

在耗散粒子动力学方法<sup>[13]</sup>中,粒子的运动规律可以通过牛顿第二定律得到,对于系统中的 $i$ 粒子,运动方程为

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \vec{v}_{i,m_i} \quad \frac{d\vec{v}_i}{dt} = \vec{f}_i \quad (1)$$

式中: $m_i$ ——粒子的质量; $\vec{r}_i$ ——粒子的位置矢量; $\vec{v}_i$ ——粒子的速度矢量。体系中第 $i$ 个粒子所受到的力<sup>[14]</sup>为

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

式中: $\vec{F}_{ij}^C$ ——粒子间的保守力; $\vec{F}_{ij}^D$ ——粒子间的耗散力; $\vec{F}_{ij}^R$ ——粒子间的随机力。 $\vec{F}_{ij}^C$ ——保守力是一种作用于粒子中心连线方向上的软排斥力,其表达式为

$$\vec{F}_{ij}^C = \begin{cases} a_{ij}(1-r_{ij})\hat{r}_{ij} & (r_{ij} < 1) \\ 0 & (r_{ij} \geq 1) \end{cases} \quad (3)$$

式中: $a_{ij}$ ——粒子 $i$ 与粒子 $j$ 间的最大排斥力。 $r_{ij} = |\vec{r}_{ij}|$ ,  $r_{ij} = r_i - r_j$ ,  $\hat{r}_{ij} = \vec{r}_{ij}/|\vec{r}_{ij}|$ ,其余2个作用力耗散力和随机力的表达式分别为

$$\vec{F}_{ij}^D = -\gamma\omega^D(r_{ij})(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{v}_{ij})\hat{r}_{ij} \quad (4)$$

$$\vec{F}_{ij}^R = \sigma\omega^R(r_{ij})\theta_{ij}\hat{\gamma}_{ij} \quad (5)$$

式中: $v_{ij} = v_i - v_j$ ;  $\omega^D(r_{ij})$ 与 $\omega^R(r_{ij})$ 表示权重因子(Weighting factor),是关于粒子间距离 $r$ 的函数。如果 $r > r_c = 1$ 时, $\omega^D$ 与 $\omega^R$ 都为0。 $\sigma$ 表示随机力系数, $\gamma$ 表示耗散力系数,用于控制耗散力的幅度。其中 $\sigma^2 = 2\gamma k_B T$ ,  $\theta_{ij}(t)$ 是关于高斯分布的随机函数,表达式为

$$\langle \theta_{ij}(t) \rangle = 0 \quad (6)$$

$$\langle \theta_{ij}(t)\theta_{kl}(t') \rangle = (\delta_{ik}\delta_{jl} + \delta_{il}\delta_{jk})\delta(t-t') \quad (7)$$

式中: $\langle \dots \rangle$ 表示求平均。权重因子 $\omega^D(r_{ij})$ 与 $\omega^R(r_{ij})$ 之间的关系可以表示为

$$\omega^D(r_{ij}) = [\omega^R(r_{ij})]^2 = \begin{cases} (1-r_{ij})^2 & (r_{ij} < 1) \\ 0 & (r_{ij} \geq 1) \end{cases} \quad (8)$$

式中: $\omega^D(r_{ij})$ ——反映粒子间的相对摩擦大小, $\omega^R(r_{ij})$ ——则反映同一对粒子间的随机力大小。体系中引入权重因子使得粒子间的耗散力与随机力满足体系为恒温系统。

### 1.2 模型构建

通过冻结固体壁面粒子形成壁面构成微通道,并对每个流体粒子施加恒定大小的外力形成压力流,采用软件Materials Studio 2019进行建模,模拟系统构建如图1。

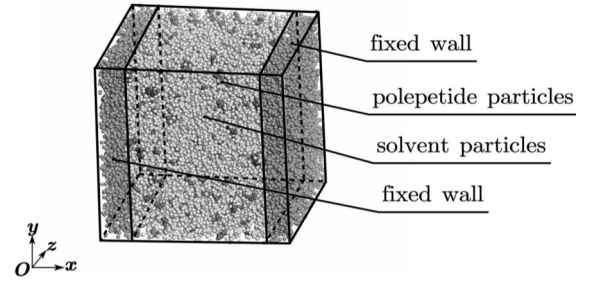


Fig.1 Construction of the simulation system

如图1,模拟区域的尺寸 $x=15.0$  nm,  $y=15.0$  nm,  $z=15.0$  nm。通道内部充满了高分子溶液,即多肽溶液受限于两壁面之间,两壁面间的距离为通道宽度大小,因此将 $x$ 方向定义为通道宽度方向(垂直壁面方向)。在 $x$ 方向两侧均设置了厚度为2.0nm的固体壁面, $y$ 和 $z$ 方向采用周期性边界条件,调整固体壁面粒子与流体粒子间的相互作用来消除边界滑移,并满足流体粒子与壁面粒子间不发生穿透。在 $y$ 方向给每个溶剂粒子和多肽粒子施加不同的驱动力形成压力驱动流<sup>[7]</sup>。在 $x$ 方向上通过冻结壁面粒子形成固体壁面边界条件,由于作用力为软势能作用力,固体壁面粒子对流体粒子的排斥力有时不足够阻止流体粒子穿透壁面,壁面附近的流体粒子可能会发生滑移,因此需要调整固体壁面粒子与流体粒子间的相互作用来消除边界滑移,并满足流体粒子与壁面粒子间不发生穿透。

模拟时共有3种不同类型的粒子,壁面粒子 $w$ 、溶剂粒子 $s$ 和多肽粒子 $p$ 。将不同氨基酸的质量加权平均后对多肽粒子 $p$ 相关参数的计算,生物界中有较多种类的低聚合度多肽,主要由2~10氨基酸组成<sup>[15]</sup>,模拟所采用的多肽由 $N=10$ 个粒子 $p$ 组成,1个

溶剂粒子  $s$  中代表了 3 个水分子，每个珠子的平均体积为  $90 \text{ \AA}^3$ ，质量为  $54 \text{ amu}$ ，半径为  $4.14 \text{ \AA}$ 。体系中珠子的数密度  $\rho r_c^3$  设为 3，表示每个格子里面有 3 个珠子，因此每个格子的体积大小为  $270 \text{ \AA}^3$ ，边长为  $6.46 \text{ \AA}$ ，所以珠子间的截断半径  $r_c$  为  $6.46 \text{ \AA}$ 。多肽与水分子的粗粒化模型如图 2 所示。

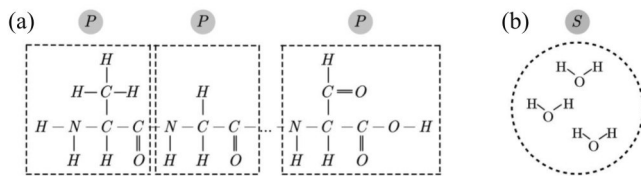


Fig. 2 Molecular structural formula and coarse-grained model of (a) polypeptide molecule and (b) water

根据文献<sup>[2, 13]</sup>确定以下参数，溶剂粒子间的排斥力系数  $a_{ss} = 25$ ，多肽粒子间的排斥力系数  $a_{pp} = 25$ ，固体壁面粒子间的排斥作用力参数  $a_{ww} = 5$ ，多肽粒子与壁面粒子间的排斥力系数  $a_{pw} = 40$ ，溶剂粒子与壁面粒子间的排斥力系数  $a_{sw} = 40$ ，多肽粒子与溶剂粒子间的排斥力系数  $a_{ps} = 10$ ，随机力系数  $\sigma = 3.0$ ，耗散力系数  $\gamma = 4.5$ ，模拟时采用的时间步长为  $\Delta t = 10 \text{ fs}$ 。

## 2 结果与讨论

### 2.1 流场强度对多肽流动特性的影响

多肽在微通道内的 Poiseuille 流动<sup>[1]</sup> 满足

Poiseuille 定律，实质是流体在压力梯度驱动下发生的流动。为使压力梯度驱动流体流动，可通过对各流体粒子施加相同的驱动力  $f$  实现。微通道内流场强度用流体粒子所受驱动力  $f$  的大小表示。为分析不同流场强度下多肽在微通道内的流动行为与迁移特性，根据模拟体系中多肽粒子的体积浓度设置为 20%，系统内各粒子先迭代运行一段时间达到平衡状态，然后对流体粒子分别施加不同的驱动力  $f = 20, 50, 80, 100$  形成压力驱动流，驱动力  $f$  越大表示流场强度越强，为了使模拟体系达到稳定，每 1000 步分别对求解参数统计平均，模拟发现，体系运行 20 万步时已完全达到了收敛的稳定状态，因此模拟一共运行 20 万步。Fig.3 给出了多肽溶液沿  $x$  方向速度分布与相对浓度分布随流场强度的变化。相对浓度可反映出多肽在通道宽度  $x$  方向上的分布与迁移行为，表示在某一位置处多肽绝对浓度与溶液浓度的比值。模拟结果表明，溶液流速出现类似抛物线分布，并随驱动力增大而增大，当驱动力较小时，溶液流速变化小，中心处与壁面处的相对浓度差值较小。随驱动力增大，壁面处相对浓度逐渐减少，中心区域相对浓度逐渐增加，多肽向通道中心区域迁移。流场强度变化导致多肽发生横向迁移，向中心迁移趋势随流场强度增大而增大，这一结果与杨镇岳等<sup>[9]</sup> 所得结论保持一致。Tab.1 给出了不同

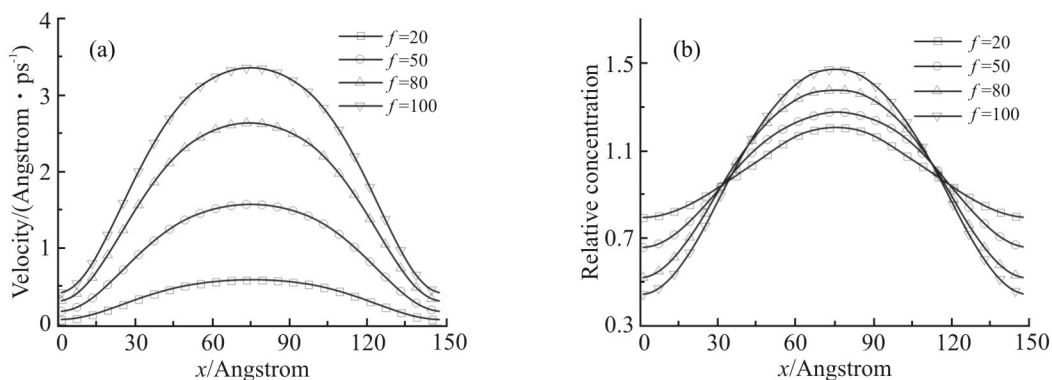


Fig. 3 Effects of different driving force  $f$  conditions on the peptide (a) velocity distribution and (b) relative concentration distribution

Tab. 1 Characteristic shear strain rate values, characteristic shear force values and characteristic viscosity values

Driving force $f$ /kcal·(mol <sup>-1</sup> ·Å)	The speed of change $\nabla v$ /(Angstrom·ps <sup>-1</sup> )	Characteristic shear strain rate $\nabla v/h$ /ps <sup>-1</sup>	Characteristic shear force $\rho f h$ /(kcal·mol <sup>-1</sup> )	characteristic viscosity $\kappa_c$ /(kcal·ps·mol <sup>-1</sup> )
20	0.392	0.071	0.11	1.549
50	1.048	0.191	0.275	1.440
80	1.722	0.313	0.44	1.406
100	2.18	0.396	0.55	1.389

驱动力下多肽溶液的特征剪切应力值、特征剪切应变率值和特征黏度值,特征黏度( $\kappa_c$ )定义为特征剪切应力与特征剪应变率的比值,表示溶液黏度的相对大小,特征剪切应力表示为 $\rho f h^2$ ,特征剪应变率表示为 $\nabla v / h$ ,溶液密度表示为 $\rho$ , $h$ 为通道宽度的1/2, $\nabla v$ 为通道宽度方向上的速度变化值。

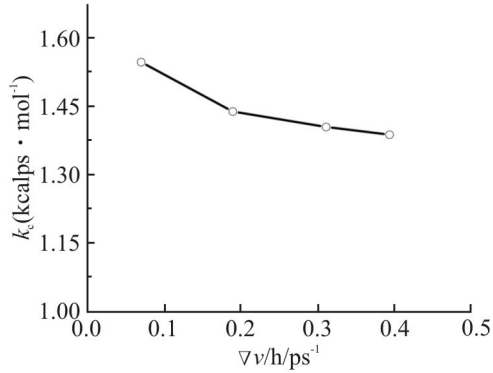


Fig.4 Relationship between characteristic viscosity  $\kappa_c$  and characteristic shear strain rate  $\nabla v / h$  of solutions

Fig.4 绘制了特征黏度与特征剪应变率之间的关系曲线。Fig.4 表明多肽溶液具有一定的非牛顿

流体特性,它的黏度特性是非线性的,表现出复杂黏性流动行为,溶液黏度随剪应变率变化而变化,随着剪应变率的增加, $\kappa_c$ 逐渐降低,溶液整体呈现出“剪切稀化”行为。

## 2.2 溶液浓度对多肽流动特性的影响

本文中多肽溶液浓度用多肽的体积浓度表示,为分析不同浓度条件下多肽在微通道内的流动行为与迁移特性,分别设置了3组不同的多肽溶液浓度,体积浓度分别为20%,30%和40%,其他条件同2.1节,在流动方向上均施加相同驱动力 $f=100$ 形成压力驱动流。Fig.5 给出了多肽溶液沿 $x$ 方向的速度分布与相对浓度分布随溶液浓度的变化。模拟结果表明,多肽浓度增大,多肽链数增加,通道中心处溶液速度随浓度增大而增大,沿 $x$ 方向溶液流速梯度随浓度增大而增大。由于溶液浓度增加,多肽链数增加,在流体力学相互作用下<sup>[15]</sup>,多肽各粒子受到来自溶剂粒子的作用力,多肽靠近壁面时这种作用力可被壁面屏蔽,但远离壁面处该作用力仍存在,导致多肽各粒子所受流体力学相互作用在壁

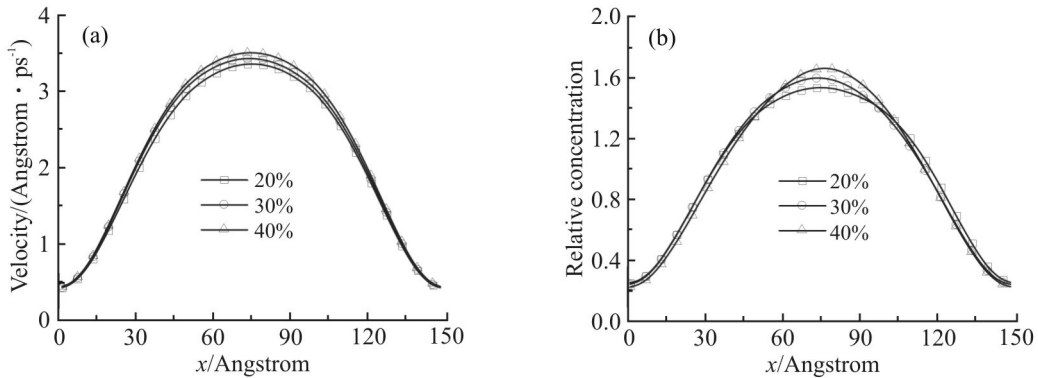


Fig.5 Effects of different solution concentration conditions on the peptide (a)velocity distribution and (b)relative concentration distribution

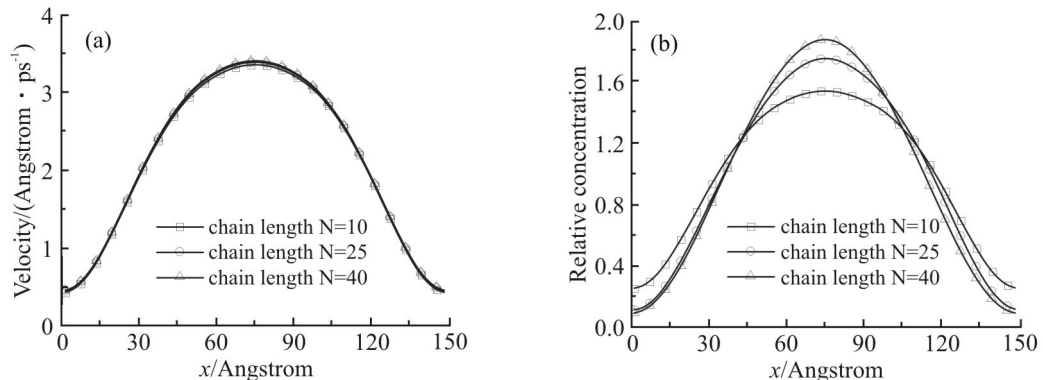


Fig. 6 Effects of different chain length conditions on the peptide (a)velocity distribution and (b)relative concentration distribution

面附近处与通道中心处不相同,使得多肽向通道中心积聚,积聚的程度随溶液浓度增加而进一步提高,整体表现出随溶液浓度增加,多肽更易向通道中心迁移的趋势。

### 2.3 链长对多肽流动特性的影响

为分析不同链长的多肽在微通道内的流动行为与迁移特性,分别设置了3组不同链长的多肽,链长分别为10,25和40,多肽的体积浓度均为20%,并在流动方向上均施加相同驱动力 $f=100$ 形成压力驱动流。Fig.6给出了多肽溶液沿 $x$ 方向速度分布与相对浓度分布随链长的变化。结果表明,虽然多肽的链长在增加,但多肽浓度保持不变,所对应多肽链的数目逐渐减少,其速度分布变化较小。其迁移机理可用Pawlowaska等<sup>[7]</sup>所得结论解释,随链长增加多肽越容易被拉伸,多肽的延展长度增加,多肽在溶液内流动更易受到剪切应力变化的影响,较小的剪切应力即可使多肽链发生拉伸。如图.7所示,粒子 $i$ 与粒子 $j$ 为两相邻粒子,粒子 $i$ 受到的弹簧力为 $F$ ,粒子 $j$ 受到的弹簧力为 $F'$ ,根据作用力与反作用力,则 $F = F'$ ,力 $F$ 产生的流场可以通过Oseen张量<sup>[1]</sup>来描述,即会产生对称的流场。但因为是在壁面附近处,这种对称流场会被壁面部分屏蔽变得不对称,壁面附近的流场 $v_i''$ 和 $v_j''$ 被壁面吸收而屏蔽, $v_i'$ 和

$v_j'$ 使多肽粒子远离壁面,这种流场作用称为流体力学相互作用,即流体力学相互作用驱使多肽远离壁面。因此拉伸的多肽在流体力学相互作用下由壁面逐渐迁移至通道中心。

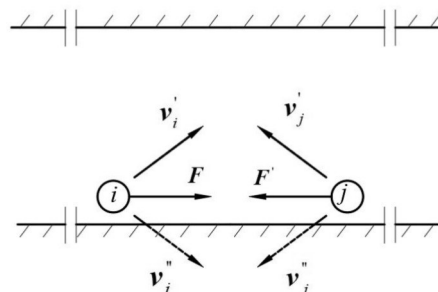


Fig.7 Schematic of the hydrodynamic interactions near the wall

### 2.4 溶剂性质对多肽流动特性的影响

为分析多肽在微通道内的流动行为与迁移特性受溶剂性质的影响。根据溶剂性质不同,可将溶剂分为无热溶剂、良溶剂和不良溶剂等,而溶剂性质可通过溶剂与溶质相互作用反映,即通过粒子间排斥力参数( $a_{ps}$ )反映。分别设置了3组不同参数 $a_{ps}$ 模拟溶质与良溶剂、无热溶剂、不良溶剂组成的溶液,参数 $a_{ps}$ 分别为10,25和40,多肽的体积浓度均为20%,并在流动方向上均施加相同驱动力 $f=100$ 形成压力驱动流。Fig.8给出了多肽溶液沿 $x$ 方向速度

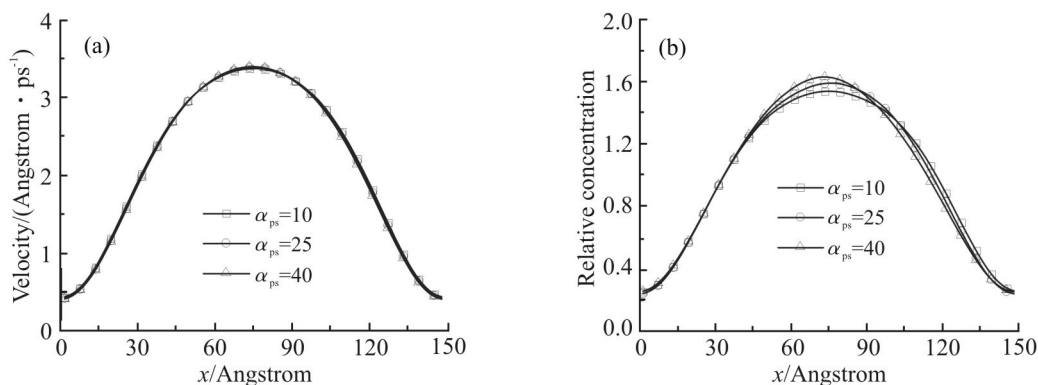


Fig.8 Effects of different solvent properties on the peptide (a)velocity distribution and (b)relative concentration distribution

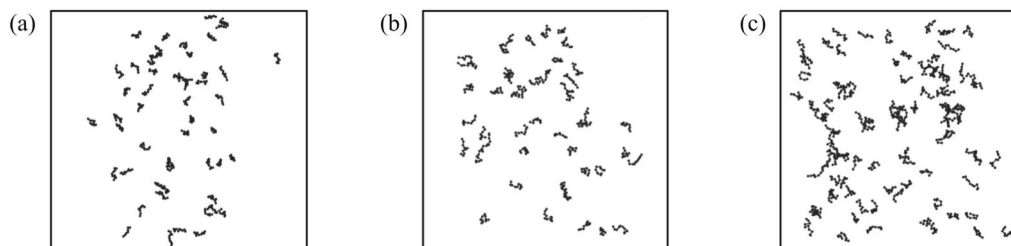


Fig.9 Polypeptide conformation distribution under different solvent properties

(a): $a_{ps} = 10$ ; (b): $a_{ps} = 25$ ; (c): $a_{ps} = 40$

分布与相对浓度分布随溶剂性质的变化。多肽粒子与溶剂粒子间参数  $a_{ps}$  表示溶剂对多肽的溶解能力,溶解能力不同,多肽构象会不同。结果表明,溶剂由良溶剂变为无热溶剂再变为不良溶剂时,多肽与溶剂之间由易溶变为互溶再变为难溶,多肽更容易向通道中心移动。背后的机理主要由多肽在不同溶剂内构象变化导致<sup>[12]</sup>, Fig.9 给出了不同溶剂性质下的多肽构象分布,其中 Fig.9(a)为多肽在良溶剂内的构象分布, Fig.9(b)为多肽在无热溶剂内的构象分布, Fig.9(c)为多肽在不良溶剂内的构象分布。由 Fig.9 可见,随溶剂溶解能力降低,多肽构象从伸展充分逐渐开始相互靠拢,在 Fig.9(c)中显示多肽粒子间缠绕联结,出现了“抱团”的现象。在壁面排斥作用下,多肽具有远离壁面的趋势,多肽链通过抱团纠缠带动相邻链一起远离壁面,这种纠缠作用随溶剂溶解能力降低而增强,通道中心处的多肽链浓度逐渐增大,在壁面排斥和抱团纠缠共同作用下,多肽链向通道中心迁移,其结果与 Usta 等<sup>[12]</sup>所提出的机理吻合良好。

### 3 结论

本文研究了微通道内压力驱动流下流场强度、多肽浓度、多肽链长、溶剂性质对多肽流动行为与迁移特性的影响,得到以下结论:

(1)在压力驱动流场作用下,多肽溶液表现为非牛顿流体特性,随着剪应变率增加,溶液特征黏度降低,溶液整体呈现“剪切稀化”特性。多肽向通道中心迁移趋势随驱动力增大而增大,壁面附近相对浓度随驱动力增大而降低;

(2)不同溶液浓度对溶液速度和多肽分布均有影响,通道内多肽整体流速随多肽浓度增大而增大,多肽远离壁面的趋势随溶液浓度增大而增大;

(3)不同链长条件下,由于多肽体积分数保持不变,链长变化对通道宽度方向上的速度分布影响不大,但随链长增加,通道中心处多肽的相对浓度增加,多肽向通道中心迁移;

(4)多肽随溶剂溶解能力降低,在溶剂内的构象从伸展充分开始相互靠拢,多肽粒子更易缠绕联结出现“抱团”纠缠现象,壁面排斥和抱团纠缠共同作用使得多肽链向通道中心迁移。

若要优化高分子微纳注塑成型和材料分离分选,该数值模拟结果可对相关器械设计与加工条件优化提供参考,能节约加工成本,提高注塑成型与分选效率。

### 参考文献

- [1] 许少锋,汪久根.微通道中高分子溶液 Poiseuille 流的耗散粒子动力学模拟[J].物理学报,2013,62(12):319-327.  
Xu S F, Wang J G. Dissipative particle dynamics simulation of macromolecular solutions under Poiseuille flow in microchannels [J]. Acta Physica Sinica, 2013, 62(12): 319-327.
- [2] Xu S F, Lou Y H, He P, *et al.* Effect of solvent quality on Poiseuille flow of polymer solutions in microchannels: a dissipative particle dynamics study[J]. Journal of Applied Polymer Science, 2019, 136: 47345.
- [3] Welch P, Muthukumar M. Molecular mechanisms of polymer crystallization from solution[J]. Physical Review Letters, 2001, 87: 3188-3191.
- [4] Pryor H I, Vacanti J P. The promise of artificial liver replacement[J]. Frontiers in Bioscience-Landmark, 2008, 13: 2140-2159.
- [5] Fang L, Hu H, Larson R G. DNA configurations and concentration in shearing flow near a glass surface in a microchannel[J]. Journal of Rheology, 2005, 49: 127-138.
- [6] Zheng J J, Yeung E S. Anomalous radial migration of single DNA molecules in capillary electrophoresis[J]. Analytical Chemistry, 2002, 74: 4536-4547.
- [7] Pawlowska S, Nakielski P, Pierini F, *et al.* Lateral migration of electrospun hydrogel nanofilaments in an oscillatory flow[J]. Plos One, 2017, 12: 0187815.
- [8] Wu S Y, Li C, Zheng Q S, *et al.* Modelling DNA extension and fragmentation in contractive microfluidic devices: a Brownian dynamics and computational fluid dynamics approach[J]. Soft Matter, 2018, 14: 8780-8791.
- [9] 杨镇岳,陈文多,刘立军,等.泊肃叶流中环形高分子的迁移行为及与线性高分子的差异[J].高分子学报,2019,50(11):1229-1238.  
Yang Z Y, Chen W D, Liu L J, *et al.* Migration of ring polymers in Poiseuille flow and comparison with linear polymers[J]. Acta Polymerica Sinica, 2019, 50(11): 1229-1238.
- [10] Palmer T L, Baardsen G, Skartlien R. Reduction of the effective shear viscosity in polymer solutions due to crossflow migration in microchannels: effective viscosity models based on DPD simulations[J]. Journal of Dispersion Science and Technology, 2018, 39: 190-206.
- [11] Xiang J T, Hajizadeh E, Larson R G, *et al.* Predictions of polymer migration in a dilute solution between rotating eccentric cylinders[J].

- Journal of Rheology, 2021, 65: 1311-1325.
- [12] Usta O B, Butler J E, Ladd A J C. Transverse migration of a confined polymer driven by an external force[J]. Physical Review Letters, 2007, 98: 098301.
- [13] Groot R D, Warren P B. Dissipative particle dynamics: bridging the gap between atomistic and mesoscopic simulation[J]. Journal of Chemical Physics, 1997, 107: 4423-4435.
- [14] Marsh C A, Backx G, Ernst M H. Static and dynamic properties of dissipative particle dynamics[J]. Physical Review E, 1997, 56: 1676-1691.
- [15] 吕集,刘娜,燕俊青,等. 林蛙卵提取高F值低聚肽混合物的酶解方法[J].食品研究与开发,2013,34(7): 117-119.
- Lü J, Liu N, Yan J Q,Wu C X, *et al.* Preparation of oligo-peptides with high Fssischer ratio by enzymatic hydrolysis of eggs of rana temporaria chensinensis[J]. Food Research and Development, 2013, 34(7): 117-119.

## Numerical Simulation of Flow and Migration Characteristics of Peptides in Microchannels

Qiaohui Zhu<sup>1</sup>, Shaofeng Xu<sup>2</sup>, Junjie Lu<sup>2</sup>, Yutao Mao<sup>3</sup>, Ziheng Wang<sup>3</sup>

(1.Department of Mechanical Engineering, Zhengjiang University, Hangzhou 310027, China;2.School of Mechatronics and Energy Engineering, Ningbo Tech University, Ningbo 315100, China;3.Faculty of Mechanical Engineering & Automation, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China)

**ABSTRACT:** Through dissipative particle dynamics method, a coarse-grained model of polypeptide was established, and the effects of flow field strength, molecular concentration, molecular chain length, and solvent properties on the flow behavior of peptides driven by pressure in microchannels were studied. It is found that the polypeptide solution exhibits shear thinning behavior, with the increase of the flow field strength, the relative concentration near the wall decreases; with the increase of the solution concentration, the flow velocity at the center of the channel increases, and the tendency of the polypeptide to move away from the wall increases; with the increase of the chain length and solvent solubility, the migration tendency of the polypeptide from the wall to the center of the channel is enhanced. Through the analysis of the flow field and relative concentration distribution under different conditions, it is suggested that different conditions have important influence on the flow and migration characteristics of polypeptide microchannels, and the flow and migration mechanism of polypeptides under different conditions was explained from the perspectives of hydrodynamics and rheology.

**Keywords:** microchannels; kinetics; numerical simulation