

纳米尺度并列双圆柱绕流的分子动力学模拟研究

李印实, 何雅玲, 孙杰, 陶文铨

(西安交通大学动力工程学院动力工程多相流国家重点实验室, 710049, 西安)

摘要: 采用分子动力学模拟方法,对纳米尺度下的等大并列双圆柱绕流问题进行了数值研究. 模拟结果表明:在低雷诺数($Re=22$)、纳米尺度下,同样存在由于 L^*/D^* (L^* 为两圆柱轴线之间的距离, D^* 为圆柱的直径)值的变化,导致流场内呈现出单涡脱落、双稳态以及双涡对称同步脱落的不同流动状态,这与宏观尺度下的研究结论相一致. 然而,各种流动状态所对应的 L^*/D^* 范围却与宏观尺度下的数值和实验研究结果不一致. 单涡脱落区域为 $L^*/D^* < 1.1$,双稳态现象出现的区域为 $1.1 < L^*/D^* < 1.8$,且由于间隙流的影响,当 $L^*/D^* = 1.2$ 时,就已出现了典型的双稳态现象,双涡对称同步脱落区域为 $L^*/D^* > 1.8$. 微观尺度下的3种不同特性的流动状态均比宏观研究结果提前,表明流动状态的变化具有明显的尺度特征.

关键词: 分子动力学;圆柱绕流;双稳态;雷诺数

中图分类号: TK124 **文献标识码:** A **文章编号:** 0253-987X(2007)07-0788-04

Molecular Dynamics Simulation Study on Nanoscale Flow Interference Between Two Circular Cylinders

Li Yinshi, He Yaling, Sun Jie, Tao Wenquan

(State Key Laboratory of Multiphase Flow in Power Engineering, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049, China)

Abstract: The nanoscale phenomenon of two identical circular cylinders arranged in a side-by-side configuration in steady cross-flow was investigated using molecular dynamics simulations with the Lennard-Jones potential model at a low Reynolds number ($Re=22$). L^*/D^* , the centre-to-centre pitch ratio, ranged from 1.0 to 2.0. Three basic flow patterns were observed and the results indicate that the characteristic ranges of the microscopic flow patterns are different from those of the macroscopic phenomenon. Single bluff-body vortex shedding range is $L^*/D^* < 1.1$. Biased flow with synchronized vortex shedding range is $1.1 < L^*/D^* < 1.8$ with the emergence of the typical biased flow at $L^*/D^* = 1.2$ because of the presence of gap flow. Symmetric flow with synchronized vortex shedding range is $L^*/D^* > 1.8$. All the boundaries of the L^*/D^* ranges corresponding to the three types of flow patterns in nanoscale are smaller than those in macroscopic phenomenon, which indicates significant scale effect.

Keywords: molecular dynamics; flow around cylinders; bistable; Reynolds number

随着科学研究不断向微细化发展,对微观尺度下流动规律的研究变得越来越重要,其中圆柱绕流现象就是一个典型的研究对象. 在圆柱绕流的研究中,多圆柱绕流现象具有广泛的应用背景和重要的工程意义.

在宏观领域,许多学者已经从实验和数值两方面对同等并列双圆柱绕流问题进行了广泛的研究^[1-5]. 然而,采用分子动力学(MD)的模拟方法,从微观层次对该问题进行研究还不多见. Rapaport 等人^[6]采用MD方法模拟得到了涡的产生、脱落和尾

迹流等现象,但文献中采用了仅具排斥作用的 WCA(Weeks Chandler Anderson)短程势能模型. Fan 等人^[7]利用 WCA 势能模型模拟了带有渐缩管的复杂流动,同时在后台阶处得到了涡的产生过程. Meiburg 等人^[8]研究了流体流过具有一定倾角的平板的流动现象,同时比较了蒙特卡洛(MC)方法和 MD 方法,得到 MD 方法在模拟涡的形成与发展方面优于 MC 方法的结论.然而,利用 MD 方法对微尺度下的并列双圆柱绕流问题进行研究,还很少见报道.

本文在前期工作^[9]的基础上,做了进一步的扩展,应用分子动力学模拟方法,对微尺度下同等大小的并列双圆柱绕流进行了研究,并获得了一些有益的结论.

1 势能函数

本文采用 Lennard-Jones 双体势能模型^[10],研究了 Ar 流体流经 Pt 金属圆柱的绕流现象,建立了相互作用的势能模型. Ar 与 Ar 粒子相互作用的势能表达式为

$$\phi_l(r_{ij}) = 4\epsilon_l \left[\left(\frac{\sigma_l}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_l}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (1)$$

式中: r_{ij} 为 2 个分子之间的距离; $\sigma_l=0.34$ nm 为流体 Ar 的长度参数; $\epsilon_l=1.67 \times 10^{-21}$ J 为能量参数.

Ar 与 Pt 粒子相互作用的势能表达式为

$$\phi_{sl}(r_{ij}) = 4\epsilon_{sl} \left[\left(\frac{\sigma_{sl}}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{sl}}{r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (2)$$

式中: σ_{sl} 和 ϵ_{sl} 分别表示 Ar 与 Pt 相互作用的长度和能量参数.由于 Pt 原子的长度参数 $\sigma_s=0.25$ nm,能量参数 $\epsilon_s=8.35 \times 10^{-20}$ J,因此根据 Lorentz-Berthelot 混合法则^[11],可以得到

$$\sigma_{sl} = (\sigma_s + \sigma_l)/2 \quad (3)$$

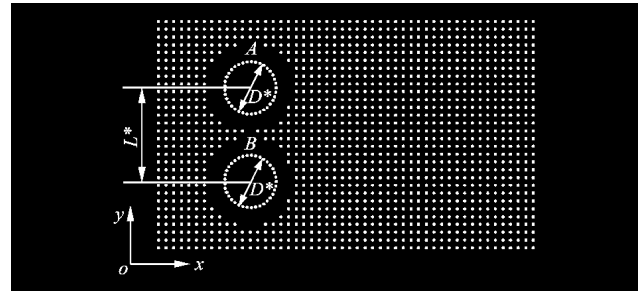
$$\epsilon_{sl} = (\epsilon_s \epsilon_l)^{1/2} \quad (4)$$

式(2)进一步还可表示为

$$\phi_{sl}(r_{ij}) = 4(\epsilon_s \epsilon_l)^{1/2} \left[\left(\frac{\sigma_s + \sigma_l}{2r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma_s + \sigma_l}{2r_{ij}} \right)^6 \right] \quad (5)$$

2 模拟方法

在初始时刻,系统内固体与液体分子的布置如图 1 所示.采用二维分子动力学模拟方法,液体分子速度按 Maxwell 分布随机取值.模拟过程中各物理量采用归一化表示^[12],具体定义为:时间 $t^* = t/(m\sigma^2/\epsilon)^{1/2}$;长度 $r^* = r/\sigma$;温度 $T_1^* = k_B T_1/\epsilon$;密度



A、B:圆柱; D^* :圆柱直径; L^* :圆柱的圆心距离

图 1 系统初始化示意图

$\rho^* = \rho\sigma^3/m$. 其中, k_B 为 Boltzmann 常数, m 为分子质量.

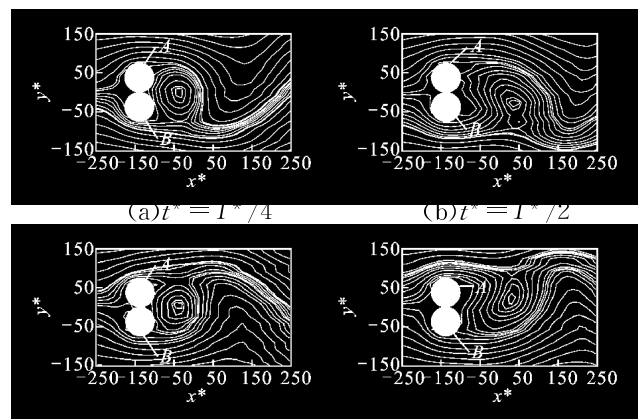
Ar 分子均匀布置于 2 个 Pt 圆柱外, $D^* = 75$,密度 $\rho^* = 0.8$, $T_1^* = 1.0$,来流速度 $U_0^* = 2.4$,截断半径 $r_{cut}^* = 2.5$,时间步长 $\Delta t^* = 0.005$.固体 Pt 原子数目为 752,流体 Ar 的分子数目为 142 000,系统尺寸为 $x^* \times y^* = 560 \times 335$,由这些初始化的设置计算得到 $Re = 22$ ^[6].同时,模拟过程中采用 leapfrog 方法对运动方程进行了积分.

在模拟过程中,当能量以及各运动相关参数保持不变,并且流线出现周期性变化时,则认为系统已达到统计要求.模拟前 10^6 步用于达到系统统计要求的状态,随后的 3×10^6 步用于统计各相关参数.

3 结果分析

3.1 单涡脱落区域

图 2 反映了流场的变化,从图中可以看出,两圆柱下游共同形成了一条涡街,图 2a~图 2d 依次表示了组成这条涡街的 2 个涡交替产生、发展和脱落的过程.其中,图 2a 表示圆柱下游顺时针方向涡的发展过程,并伴随着逆时针方向涡的脱落过程.图 2b 表示圆柱下游顺时针方向涡的脱落过程,图 2c 表示



T^* : 涡的脱落周期

图 2 一个周期内的流线图($L^*/D^* = 1.0$)

随着过程的进行,圆柱下游逆时针方向涡的发展过程,并伴随着顺时针方向涡的脱落过程,图 2d 表示圆柱下游逆时针方向涡的脱落过程. 图 2 中只形成一条涡街的结果与文献[5]相同,由于 2 个圆柱之间没有缝隙,因此不存在间隙流的影响.

图 3 为一个周期内涡的脱落过程,这一过程与图 2 过程相似,均为周期性的,但图 3 所示更为复杂,从中可明显看出间隙流的影响. 图 3a 和图 3d 表明间隙流偏向 A 圆柱,图 3b 和图 3c 表明间隙流偏向 B 圆柱,这说明伴随着涡的产生、组合、发展和脱落的周期性运动过程,间隙流随时间的变化也出现了周期性的摆动,使得运动形式更加复杂.

图 4 为 2×10^5 步平均后得到的流线图,显示了 2 个对称的涡. 随着 L^*/D^* 值的增大,间隙流的影响越来越强烈,使得涡的整体脱落过程发生改变,并显著地表现在图中. 相对于图 4a,图 4b 中对称涡的位置向下游偏移了一段距离,可见在单一涡街的

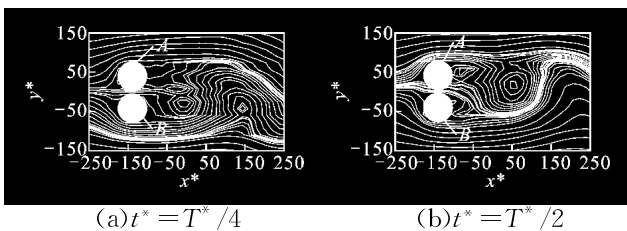
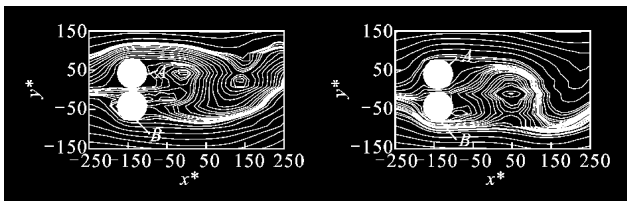
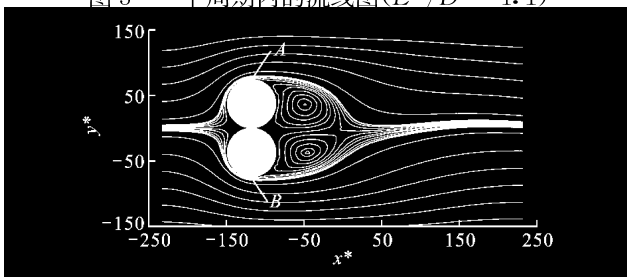
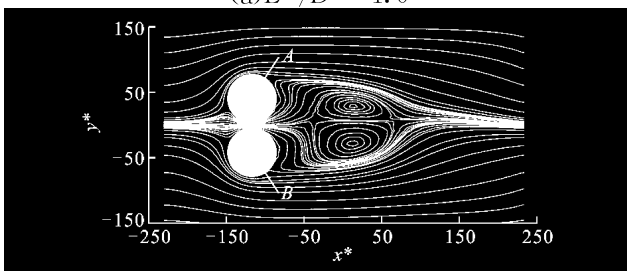
(a) $t^* = T^*/4$ (b) $t^* = T^*/2$ (c) $t^* = 3T^*/4$ (d) $t^* = T^*$ 图 3 一个周期内的流线图($L^*/D^* = 1.1$)(a) $L^*/D^* = 1.0$ (b) $L^*/D^* = 1.1$

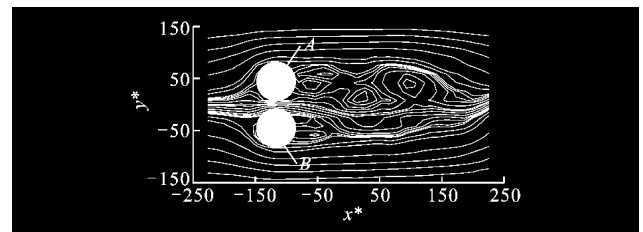
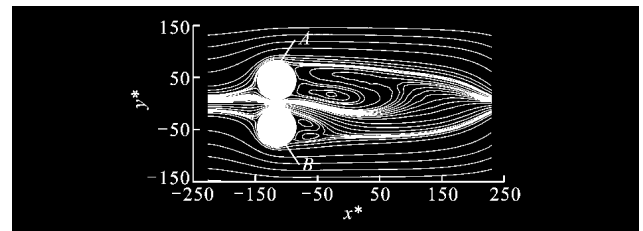
图 4 时均流线图

形成过程中,绕圆柱外侧的剪切流起了主要作用[5].

进一步的研究表明,单一涡街的脱落区域发生在 $L^*/D^* < 1.1$ 的范围内,当这一比值继续增大时,就会出现“双稳态现象”[5],这一范围($L^*/D^* < 1.1$)比文献[1,5]的范围($L^*/D^* < 1.2$)缩小了,这可能是由微观与宏观间的尺度差异引起的.

3.2 双稳态区域

在图 5a 所示的瞬时流线图中可以看出,由于间隙流的影响,缝隙一侧(B 圆柱下游)的尾迹变窄,另一侧(A 圆柱下游)的尾迹变宽,两圆柱下游形成了复杂的涡街,即“双稳态现象”,这一现象与文献[5]相同. 在图 5b 中,这种偏流更加明显,所产生的“双稳态现象”使得涡的周期性脱落过程完全消失,随着 L^*/D^* 的增大,间隙流的影响变得越来越小. 进一步的模拟研究表明,当 $L^*/D^* > 1.8$ 时,这种“双稳态现象”不再存在.

(a) 瞬时流线图($t^* = 3 \times 10^6$ 步)(b) 时均流线图($t^* = 2 \times 10^5$ 步)图 5 瞬时及时均流线图($L^*/D^* = 1.2$)

3.3 双涡的对称同步脱落区域

Williamson[3]提出了并列双圆柱绕流进入双涡对称同步脱落区域的标准,即双涡的对称同步脱落区域应当出现反相同步脱落的 2 条平行涡街. 根据这一标准,本文的模拟结果表明,当 $L^*/D^* > 1.8$ 时,并列双圆柱的运动形式就已经进入了双涡的对称同步脱落区域.

从图 6a 的瞬时流线图中可以看出,在 2 个并列圆柱下游形成了一对反相同步脱落的涡街. Sumner 等人[5]的实验研究表明,在这一区域并不是总出现反相的平行涡街,同时还会出现同相的平行涡街. 本文的模拟也得到了这种同相平行涡街,如图 6b 所示,两并列圆柱的下游出现的是 2 条同相平行涡街.

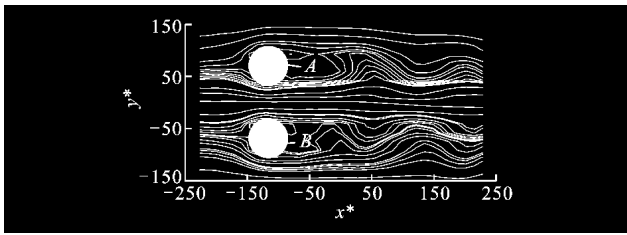
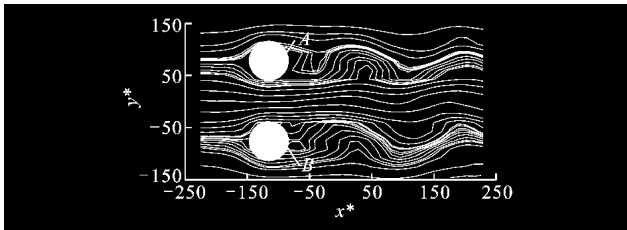
(a) $L^*/D^* = 1.85, t^* = 1 \times 10^6$ 步(b) $L^*/D^* = 2, t^* = 4 \times 10^6$ 步

图6 瞬时流线图

4 结论

本文应用分子动力学模拟方法,对纳米尺度条件下并列双圆柱绕流现象进行了研究,结果如下。

(1)在低雷诺数、纳米尺度条件下,与宏观一样,同样存在由于 L^*/D^* 值的不同而产生的单涡脱落区域、双稳态区域以及双涡对称同步脱落区域,但区域的范围与宏观值不同。

(2)由于尺度效应的影响,相对于宏观状态下3个不同的区域,在尺度条件下依次划分为单涡脱落区、双稳态区和对称同步脱落区。在间隙流的影响下,3个不同特性的流动区域都比宏观尺度下的研究结果提前出现。

(3)当 L^*/D^* 的值增大到 1.2 时,本文的模拟结果表明,并列双圆柱绕流已出现了典型的双稳态现象。

(4)在对称同步脱落的区域内,模拟过程中同时得到了反相和同相的平行涡街。

参考文献:

[1] Zdrovkovich M M. Review of flow interference between two circular cylinders in various arrangements [J]. ASME Journal of Fluids Engineering, 1977, 99:

618-633.

- [2] El-Taher R M. Experimental study of the interaction between a pair of circular cylinders normal to a uniform shear flow[J]. Journal of Wind Engineering and Industrial Aerodynamics, 1984, 17(1): 117-132.
- [3] Williamson C H K. Evolution of a single wake behind a pair of bluff bodies[J]. Journal of Fluids Mechanics, 1985, 159:1-18.
- [4] Kim H J, Durbin P A. Investigation of the flow between a pair of circular cylinders in the flopping regime [J]. Journal of Fluid Mechanics, 1988, 196: 431-448.
- [5] Sumner D, Wong S S T, Price S J, et al. Fluid behavior of side-by-side circular cylinders in steady cross flow[J]. Journal of Fluids and Structures, 1999, 13 (3):309-338.
- [6] Rapaport D C, Clementi E. Eddy formation in obstructed fluid flow: a molecular-dynamics study[J]. Physical Review Letters, 1986, 57(6): 695-698.
- [7] Fan X J, Nhan P T, Yong N T, et al. Molecular dynamics simulation of a liquid in a complex nano channel flow[J]. Physics of Fluids, 2002, 14(3): 1146-1153.
- [8] Meiburg E. Comparison of the molecular dynamics method and the direct simulation Monte Carlo technique for flows around simple geometries[J]. Physics of Fluids, 1986, 29(10): 3107-3113.
- [9] 李印实,何雅玲,孙杰,等.纳米通道圆柱绕流现象的分子动力学模拟研究[C]//2006年工程热力学与能源利用学术会议论文集.重庆:工程热物理学会,2006:106-110.
- [10] Nagayama G, Cheng Ping. Effects of interface wettability on microscale flow by molecular dynamics simulation[J]. International Journal of Heat and Mass Transfer, 2004, 47(3): 501-513.
- [11] Delhomme J, Millie P. Inadequacy of the Lorentz-Berthelot combining rules for accurate predictions of equilibrium properties by molecular simulation [J]. Molecular Physics, 2001, 99(8): 619-625.
- [12] Rapaport D C. The art of molecular dynamics simulation[M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1995:1-17.

(编辑 管咏梅 王焕雪)