

纳米尺度圆柱绕流尾迹区流动形式模拟研究¹⁾

李印实 何雅玲²⁾ 孙杰 陶文铨

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

摘要 采用非平衡分子动力学模拟方法, 对微尺度低 Re 数下的圆柱绕流问题进行了研究, 模拟结果表明: 当 $Re < 12$ 时, 圆柱下游形成对称、无分离的定常流; 当 $Re > 20$ 时, 圆柱下游形成周期性交替出现的对称涡; 当 $12 < Re < 20$ 时, 圆柱下游开始有涡形成, 但并不是稳定的涡对, 而是处于上述两个区域的过渡阶段. 上述前两区域的流动特性与宏观尺度下的特性相同, 但得到的 Re 数范围不同. 当来流速度超过当地音速后, 没有涡的产生, 而是在下游紧靠近壁面的区域内形成了空穴, 且下游伴随有物理量的突变. 上述微观尺度与宏观尺度的不同流动特性, 表现出了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, 涡

中图分类号: O357 **文献标识码:** A **文章编号:** 0459-1879(2008)03-0323-08

引 言

随着科学技术的发展, 特别是微电子技术的发展, 微尺度下的流动与传热问题变得越来越重要. 许多研究表明, 微尺度流动与传热现象的一些性质表现出了与宏观尺度条件时的差异^[1]. 因此采用微观方法对微尺度下的流动与传热问题进行研究就显得非常重要.

近些年, 随着计算机计算速度的不断提高, 快速发展起来的分子动力学模拟 (molecular dynamics simulation, MDS) 技术, 在对微观领域的研究方面发挥了重要作用^[2,3]. 作为流动的典型代表, 宏观尺度下的圆柱绕流现象已被广泛研究^[4], 但对于微尺度下的研究还有待于进一步的认知. 就分子动力学模拟而言, 早期的 Rapaport 等^[5] 曾用 Weeks-Chandler-Anderson 势能模型对圆柱绕流做了探讨. Meiburg 等^[6] 研究了平板流动现象, 利用 MDS 方法得到了涡.

本文利用分子动力学模拟方法, 对微尺度下的圆柱绕流现象进行了详细的研究, 并得到了不同 Re 数下绕流的不同运动特性, 从而为认识微尺度下的流动特性提供了一定的依据.

1 势能函数

本文的研究内容为氩 (Ar) 流体流经由铂 (Pt)

原子构成的圆柱绕流现象. 所选用的势能函数如下^[7].

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} 为两个分子之间的距离, Ar 的尺度参数 $\sigma_l = 0.34 \text{ nm}$, 能量参数 $\epsilon_l = 1.67 \times 10^{-21} \text{ J}$.

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 相互作用的尺度参数和能量参数, 其中, 固体 Pt 的尺度参数 $\sigma_s = 0.25 \text{ nm}$, 能量参数 $\epsilon_s = 8.35 \times 10^{-20} \text{ J}$; 根据 Lorentz-Berthelot^[3] 混合法则计算可以得到

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

$$\epsilon_{sl} = \sqrt{\epsilon_s \epsilon_l} \quad (4)$$

因此, 式 (2) 可以进一步表示为

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

2 模拟方法

本文采用二维分子动力学模拟方法进行研究.

2007-04-23 收到第 1 稿, 2007-10-22 收到修改稿.

1) 国家重点基础研究发展计划资助 (2007CB206902), 国家自然科学基金资助项目 (50629601).

2) E-mail: yalinghe@mail.xjtu.edu.cn

模拟过程中各物理量采用无量纲化表示^[3]. 具体定义如下:

$$\text{时间: } t^* = t / (m\sigma^2/\varepsilon)^{1/2}$$

$$\text{长度: } r^* = r/\sigma$$

$$\text{温度: } T_i^* = k_B T_i / \varepsilon$$

$$\text{密度: } \rho^* = \rho\sigma^3/m$$

其中, $m = 6.69 \times 10^{-26}$ kg 为 Ar 分子质量, $k_B = 1.38 \times 10^{-23}$ J/K 为 Boltzmann 常数.

雷诺数 $Re = D^*u^*/\nu^*$, 其中 ν^* 表示运动黏性系数, 与模拟系统的剪切速率、温度和密度等有关, 准确的统计得到 ν^* 十分困难. 本文采用文献 [8] 中的取值 $\nu^* = 8.3$.

初始时刻系统的固体与液体分子位置布置如图 1 所示. 圆柱由 Pt 原子构成, 流体由 Ar 分子构成, 圆柱假设为无限长. 圆柱直径 D^* 为 89, 密度 ρ^* 取为 0.8, 温度 T_i^* 取为 1.0, 截断半径 r_{cut}^* 取为 2.5, 时间步长 Δt^* 取为 0.005. 圆柱壁面固体 Pt 的原子数为 449, 流体 Ar 的分子数为 234 408, 系统尺寸为 $x^* \times y^* = 670 \times 447$. 同时初始速度按 Maxwell 分布随机取值, 模拟过程采用 leapfrog 算法对运动方程进行积分. y 方向边界采取周期性处理, x 方向进出口边界分别采取补充与移除流体分子的方法处理.

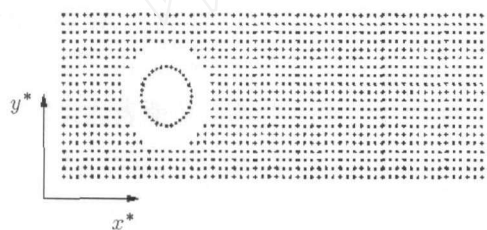


图 1 初始时刻系统布置示意图

Fig.1 Schematic figure of system initialization

模拟过程中, 当各能量及与运动有关的参数基本保持不变时, 认为系统已达到统计的平衡要求. 模拟中取前 1×10^6 步为系统平衡时间, 随后 2×10^6 步用于统计各相关参数. 其中, 采用 5×10^5 步得到时均统计值.

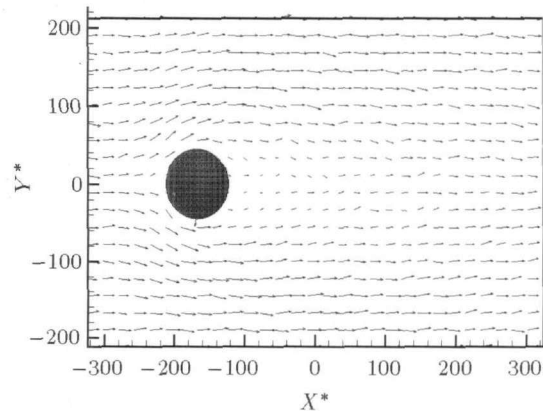
3 结果分析

本文对亚音速和跨音速等不同条件下的圆柱绕流进行了研究, 通过流线和速度矢量图等物理量的不同表现形式, 得到了不同区域内的流动特性.

3.1 亚音速圆柱绕流研究

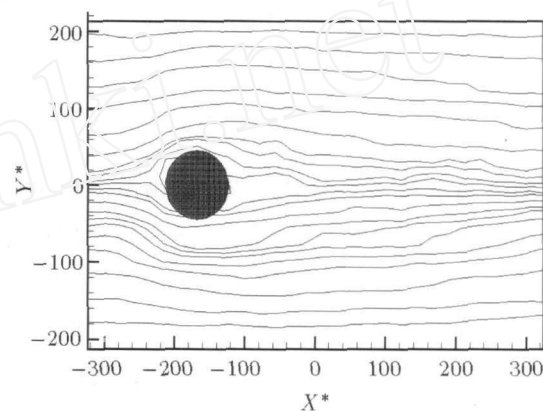
图 2 是来流速度 U_0^* 为 0.4, 即 $Re = 4$ 时的瞬时速度矢量图和流线图. 从图中可以看出, 在这一

来流速度下, 圆柱下游没有产生涡. 流动表现出对称、无分离的定常流动. 为了更清楚地认识此 Re 数下的流动分布情况, 图 3 给出了 5×10^5 步平均后得



(a) 速度矢量图

(a) Velocity vectors

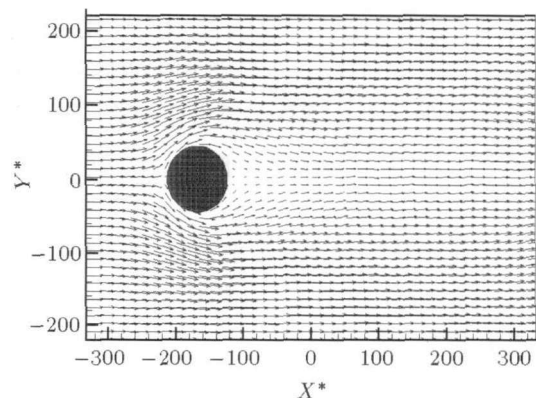


(b) 流线图

(b) Streamlines

图 2 瞬时速度矢量图和流线图 ($Re = 4$)

Fig.2 Instantaneous velocity vectors and streamlines ($Re = 4$)

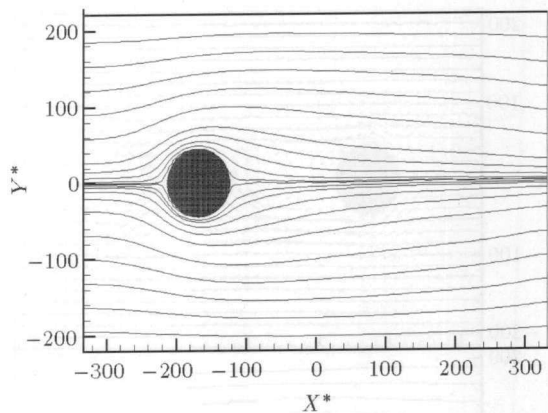


(a) 速度矢量图

(a) Velocity vectors

图 3 时均速度矢量图和流线图 ($Re = 4$)

Fig.3 Time-averaging velocity vectors and streamlines ($Re = 4$)



(b) 流线图
(b) Streamlines

图 3 时均速度矢量图和流线图 ($Re = 4$) (续)

Fig.3 Time-averaging velocity vectors and streamlines
($Re = 4$) (continued)

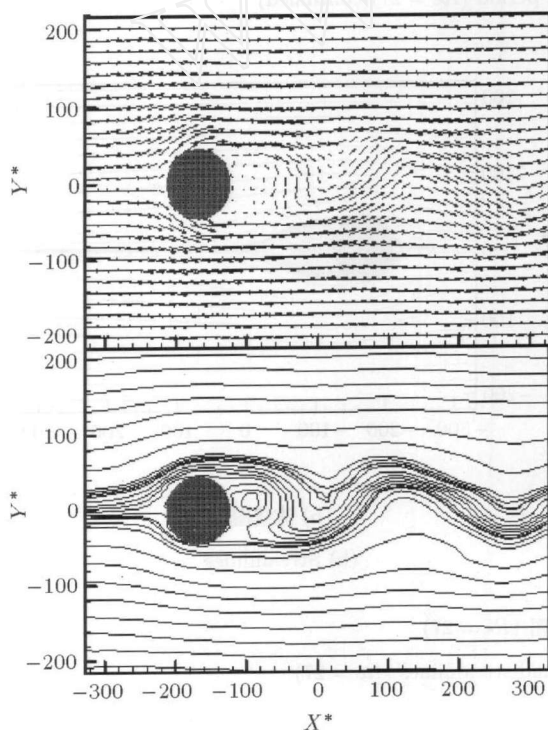
到的速度矢量图和流线分布图, 从图中可以清楚地看到在小 Re 数时流动的对称性和无分离性.

对一系列不同 Re 数下的圆柱绕流研究表明, 当 $Re < 12$ 时, 圆柱下游会形成如图 2 和图 3 所示的对称、无分离的定常流. 这一流动特性与宏观尺度

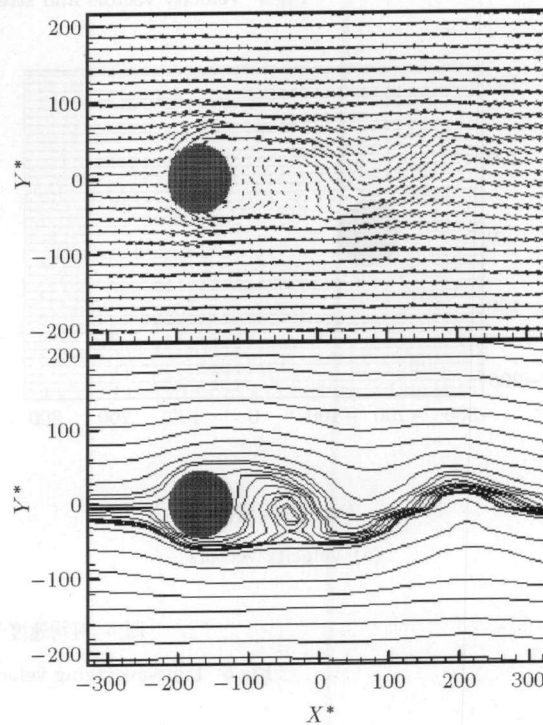
下的研究结果相同, 但由于尺度差异产生的影响, 宏观尺度范围缩小为 $Re < (5 \sim 6)^{[4]}$.

当 $Re > 20$ 时, 在圆柱下游形成的是周期性交替出现的对称涡. 图 4 所示为 $Re = 27$ 时一个涡的脱落周期内的瞬时速度矢量图和流线图, 图中分别表示了圆柱后方的双涡交替产生、发展和脱落的过程. 其中, 图 4(a) 表示顺时针方向涡的产生过程, 并伴随着逆时针方向涡的脱落过程; 图 4(b) 表示顺时针方向涡的发展过程; 图 4(c) 表示逆时针方向涡的产生过程, 并伴随着顺时针方向涡的脱落过程; 图 4(d) 表示逆时针方向涡的发展过程. 图 4 所显示的涡的运动过程与文献 [9] 的实验结果及作者前期的数值研究结果^[10] 相同. 图 5 是上述周期性流动过程经过 5×10^5 步平均后得到的速度矢量图和流线图, 时均图表明在圆柱后方形成了两个对称的反向涡.

上述 $Re > 20$ 时流体表现出来的流动现象, 与宏观尺度下 $Re > (46 \sim 47)$ 的研究结果相同, 此时在圆柱下游出现的是涡的周期性交替脱落现象^[4].



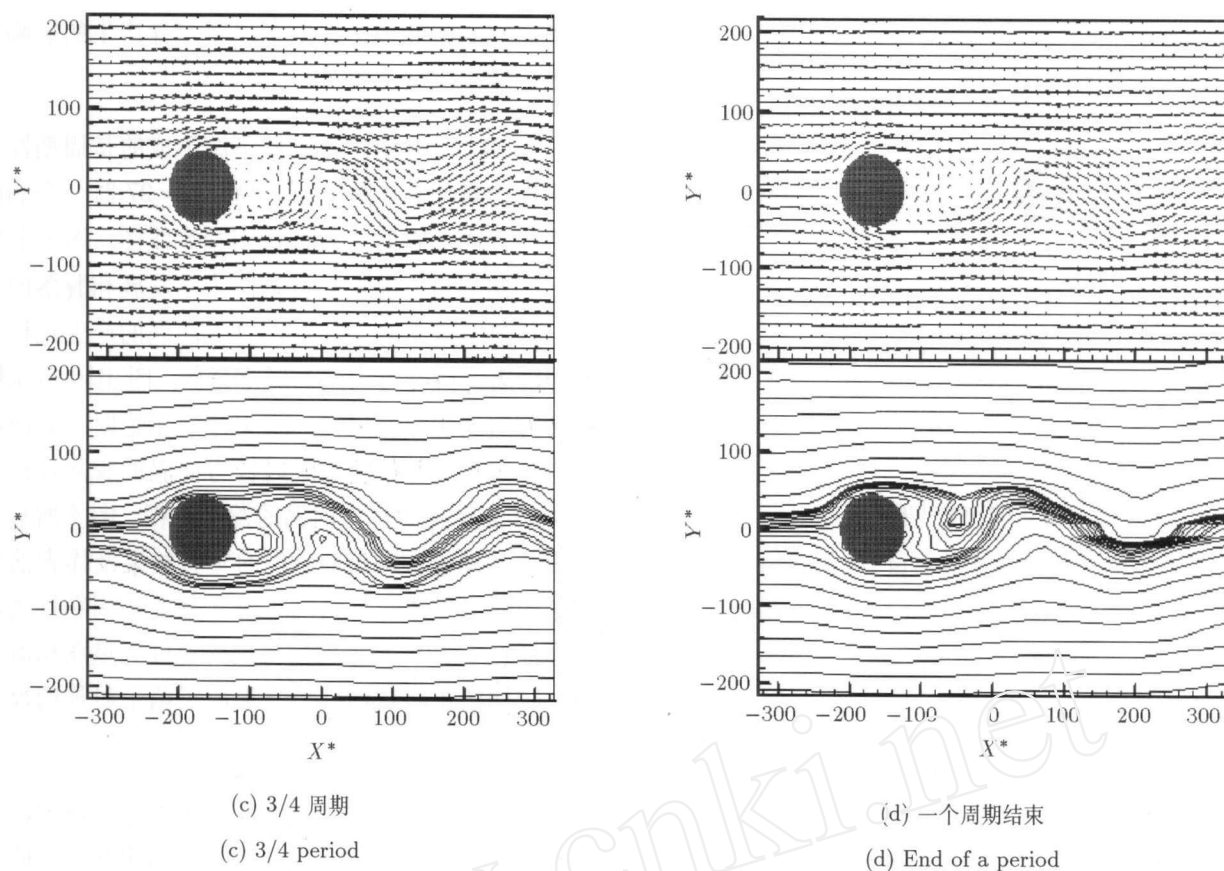
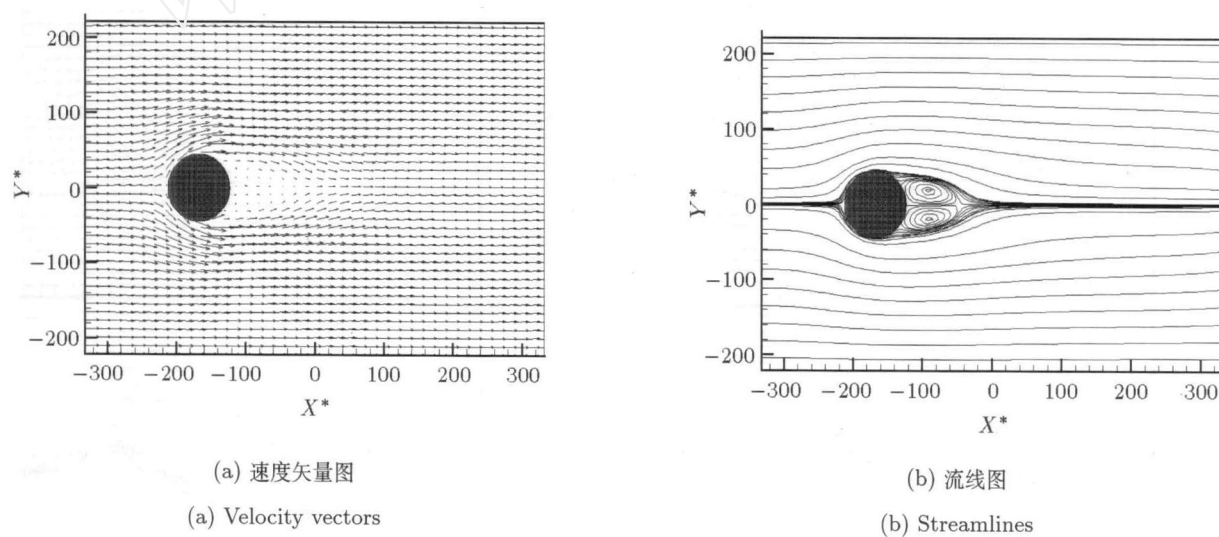
(a) 1/4 周期
(a) 1/4 period



(b) 1/2 周期
(b) 1/2 period

图 4 一个周期内的速度矢量图和流线图 ($Re = 27$)

Fig.4 Velocity vectors and streamlines in a period ($Re = 27$)

图 4 一个周期内的速度矢量图和流线图 ($Re = 27$)(续)Fig.4. Velocity vectors and streamlines in a period ($Re = 27$)(continued)图 5 时均速度矢量图和流线图 ($Re = 27$)Fig.5 Time-averaging velocity vectors and streamlines ($Re = 27$)

进一步研究表明, 当来流速度 $U_0^* = 1.61$ 即 $Re = 17$ 时, 如图 6 所示, 低 Re 数下的对称、无分离的定常流动 ($Re < 12$ 的情况) 开始消失, 圆柱下游开始形成涡, 但这种涡不是对称的稳定涡对, 而是逐渐向周期性交替出现的对称涡 ($Re > 20$ 的情况) 发展。

图 7 给出了 $Re = 17$ 时, 5×10^5 步的时均速度矢量图和流线图, 从图中得到的是两个反向的对称涡。由于此时来流速度较小, 与图 5 相比, 两个涡对变小。

当 $12 < Re < 20$ 时, 圆柱下游开始有涡形成, 但其瞬时值很不稳定, 也无周期性, 处于从对称、无

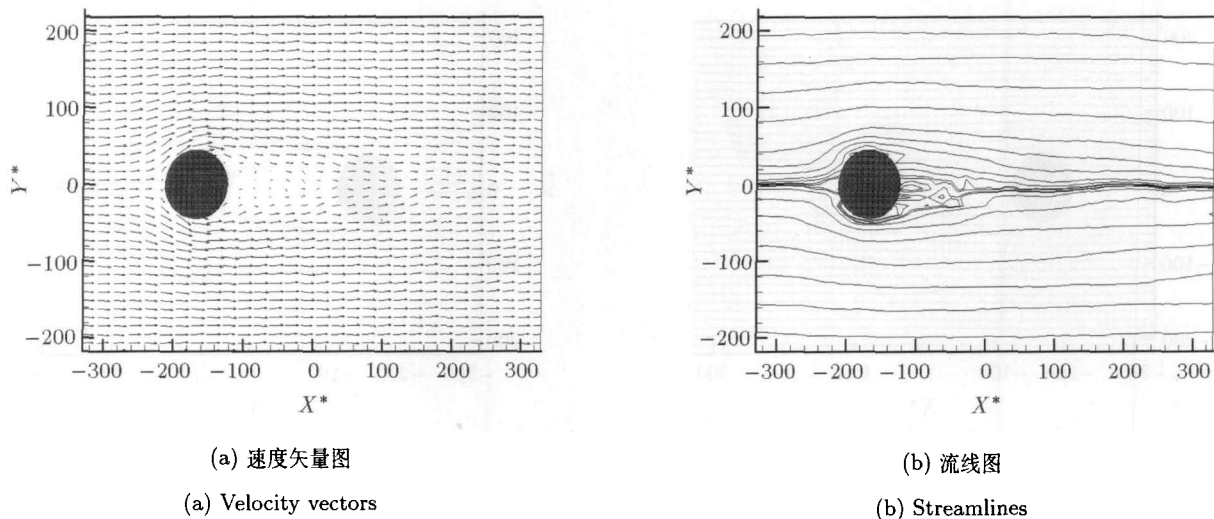


图 6 瞬时速度矢量图和流线图 ($Re = 17$)

Fig.6 Instantaneous velocity vectors and streamlines ($Re = 17$)

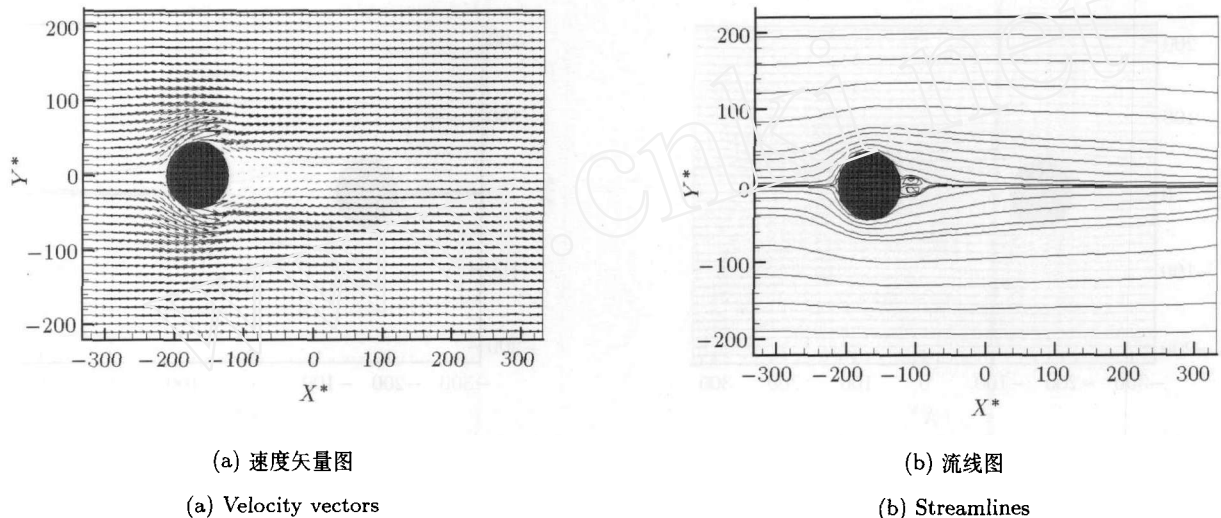


图 7 时均速度矢量图和流线图 ($Re = 17$)

Fig.7 Time-averaging velocity vectors and streamlines ($Re = 17$)

分离的定常流动向周期性交替出现的对称涡流动的过渡阶段,且时均统计得到的涡尺寸随 Re 数的增大而增加.

综合以上分析可以看到,随着 Re 数的增加,圆柱绕流呈现 3 个特征阶段:当 $Re < 12$ 时,流体在圆柱下游形成对称、无分离的定常流;当 $12 < Re < 20$ 时,圆柱下游开始有涡形成,但这种涡并不稳定,处于过渡阶段;当 $Re > 20$ 时,在圆柱下游形成的是稳定的周期性交替出现的对称涡.

3.2 跨音速圆柱绕流研究

继续增大来流速度至 $U_0^* = 10$ 与 $U_0^* = 12$,分别对应 $Re = 108$ 与 $Re = 130$,此时圆柱下游尾迹区内的涡完全消失.并且出现了流体与圆柱壁面的分离

现象,即在尾迹区内产生了空穴,即密度极小的区域.图 8,图 9 分别从速度矢量和流线两方面对该现象进行了刻画.进一步的数据分析表明,当来流速度 U_0^* 与当地音速接近时,尾迹区流动形式开始变得复杂;当 U_0^* 继续增大超过当地音速后,空穴现象逐渐开始出现,该现象随速度的增大而更加明显.针对本文模拟结果,无量纲当地音速约为 5.8,开始产生空穴的条件为 $65 < Re < 80$.为了形象的证实这个空穴的存在,图 10 给出了系统达到平衡后某一个时刻的快照,图中清楚的显示了圆柱下游空穴的存在.

空穴的形成是由于来流速度非常大,每个分子都具有很高的动能,当高速的 Ar 流体分子与壁面的 Pt 原子相互作用后仍延续来流的方向前进,也即分子间的相互作用势不足以完全改变分子的前进方向

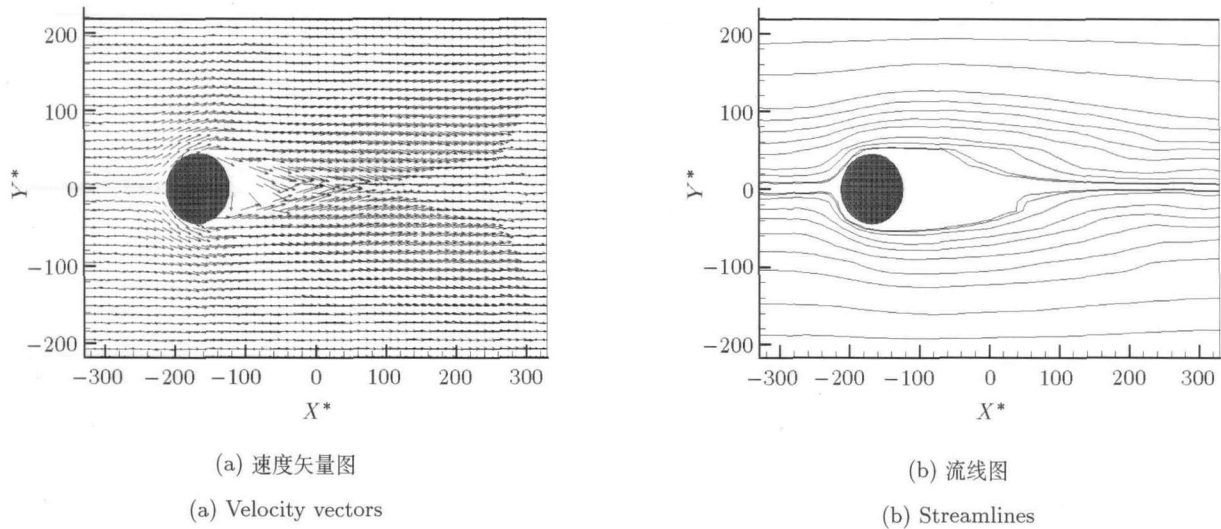


图 8 时均速度矢量图和流线图 ($Re = 108$)

Fig.8 Time-averaging velocity vectors and streamlines ($Re = 108$)

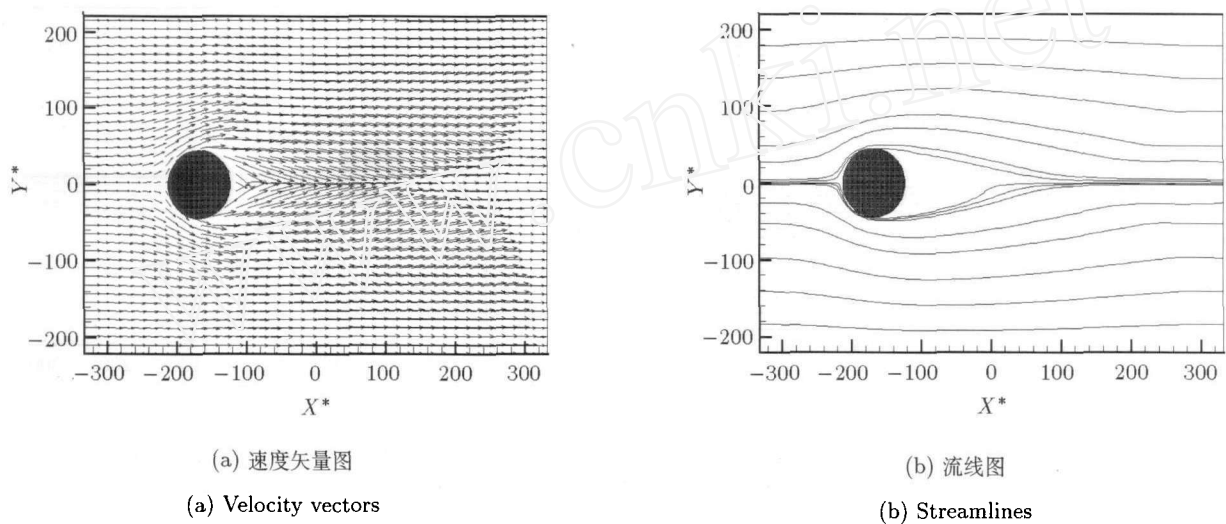


图 9 时均速度矢量图和流线图 ($Re = 130$)

Fig.9 Time-averaging velocity vectors and streamlines ($Re = 130$)

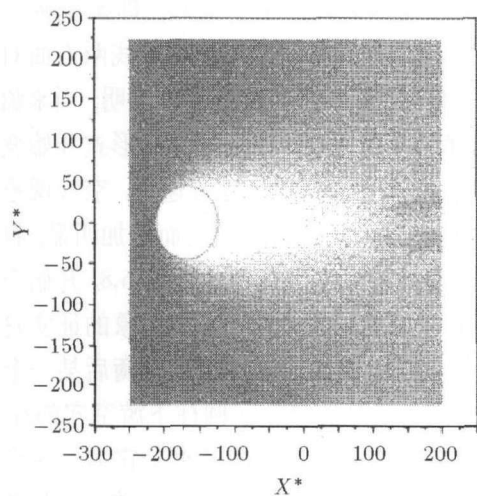


图 10 系统快照 ($Re = 130$)

Fig.10 Snapshot of system ($Re = 130$)

而形成反向涡。

图 11 和图 12 分别是经过 5×10^5 步平均后得到的时均速度场和密度场的分布:

(1) 图 11(a) 是来流方向速度的整场分布图, 圆柱后方没有形成闭合的等值线, 即没有涡的出现。

(2) 图 11(b) 是密度场的分布情况, 等值线离圆柱越远数值越大, 最低区域出现在圆柱下游近圆柱壁面附近, 这一区域的密度值为 0。

进一步研究圆柱下游紧靠壁面处宽度为 6 的横向典型区域内速度和密度分布情况 (如图 12 所示) 得到:

(1) 图 12(a) 为沿跨度方向将系统剖分 80 等份后, 统计得到的 u^* 速度分量的时均流速图。速度在

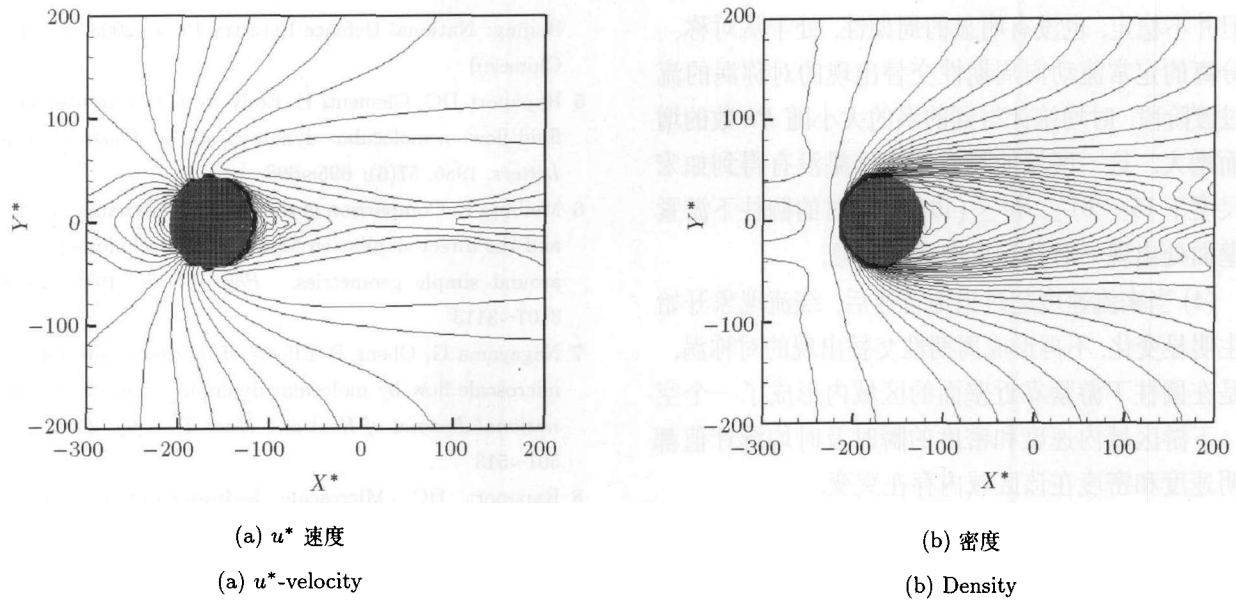


图 11 时均场的分布

Fig.11 Time-averaging u^* -velocity and density

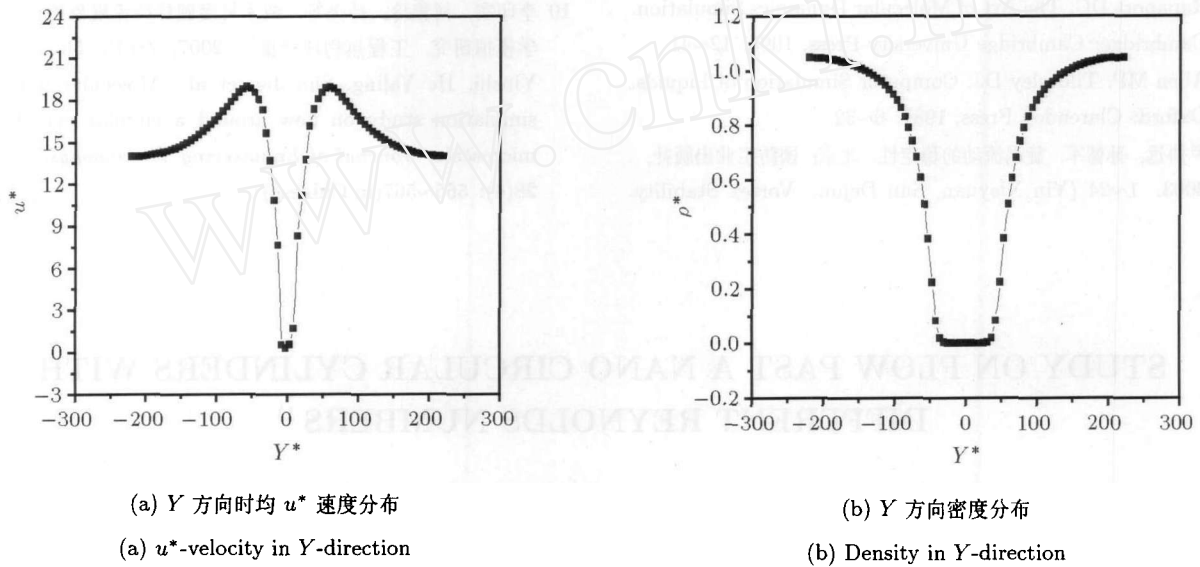


图 12 典型区域时均速度和密度分布

Fig.12 Time-averaging velocity and density in typical region

跨度方向是严格对称的. 图 11(a) 中没有回流区的出现, 在图 12(a) 中表现为速度值均大于 0.

(2) 图 12(c) 为沿这一剖分下的密度分布图, 从图中看出, 在紧靠近圆柱后方的剖分区域内, 密度值为 0, 这一现象再次证明了图 10 所得到的圆柱后方存在空穴.

4 结 论

本文采用分子动力学模拟方法, 对纳米尺度不同 Re 数下的圆柱绕流问题进行了研究, 得到如下主

要结论:

(1) 微观尺度下, 随 Re 数增加存在 3 个不同的流动特征区域, 这与宏观尺度研究结论一致, 但各区域对应的 Re 数范围不同.

(2) 当 $Re < 12$ 时, 圆柱下游形成对称、无分离的定常流, 这与宏观尺度下 $Re < (5 \sim 6)$ 的范围内表现出的现象相同. 同时当 $Re > 20$ 时, 圆柱下游形成的是周期性交替出现的对称涡, 这也与宏观尺度下 $Re > (46 \sim 47)$ 的现象相同.

(3) 当 $12 < Re < 20$ 时, 圆柱下游开始有涡形

成但并不稳定,也没有明显的周期性,处于从对称、无分离的定常流动向周期性交替出现的对称涡的流动过渡阶段.时均统计得到的涡的大小随 Re 数的增加而增大.这一区域的瞬时统计结果没有得到如宏观尺度下 $(5 \sim 6) \leq Re \leq (46 \sim 47)$ 时的圆柱下游紧靠壁面处出现一对稳定反向涡的现象.

(4) 当来流速度超过当地音速后,绕流现象开始发生明显变化,不再形成周期性交替出现的对称涡,而是在圆柱下游紧靠壁面的区域内形成了一个空穴.下游区域内速度和密度的瞬时及时均统计值都表明速度和密度在该区域内存在突变.

参 考 文 献

- 1 过增元. 国际传热研究前沿——微细尺度传热. 力学进展, 2000, 30(1): 1~6 (Guo Zengyuan. Frontier of heat transfer—microscale heat transfer. *Advance in Mechanics*, 2000, 30(1): 1~6 (in Chinese))
- 2 Rapaport DC. *The Art of Molecular Dynamics Simulation*. Cambridge: Cambridge University Press, 1995. 12~41
- 3 Allen MP, Tildesley DJ. *Computer Simulation of Liquids*. Oxford: Clarendon Press, 1987. 6~32
- 4 尹协远, 孙德军. 旋涡流动的稳定. 北京: 国防工业出版社, 2003. 1~24 (Yin Xieyuan, Sun Dejun. *Vortex Stability*. Beijing: National Defence Industry Press, 2003. 1~24 (in Chinese))
- 5 Rapaport DC, Clementi E. Eddy formation in obstructed fluid flow: a molecular-dynamics study. *Physical Review Letters*, 1986, 57(6): 695~698
- 6 Meiburg E. Comparison of the molecular dynamics method and the direct simulation Monte Carlo technique for flows around simple geometries. *Phys Fluids*, 1986, 29(10): 3107~3113
- 7 Nagayama G, Cheng P. Effects of interface wettability on microscale flow by molecular dynamics simulation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 2004, 47(3): 501~513
- 8 Rapaport DC. Microscale hydrodynamics: Discrete-particle simulation of evolving flow patterns. *Phys Rev A*, 1987, 36(7): 3288~3299
- 9 吴剑, 齐鄂荣, 李炜等. 应用 PIV 系统研究横流中近壁水平圆柱绕流旋涡特性. 水科学进展, 2005, 16 (5): 628~633 (Wu Jian, Qi Erong, Li Wei, et al. Research on vortexes of cross flow past a horizontal circular by PIV system. *Advances in Water Science*, 2005, 16 (5): 628~633 (in Chinese))
- 10 李印实, 何雅玲, 孙杰等. 纳米尺度圆柱绕流现象的分子动力学模拟研究. 工程热物理学报, 2007, 28(4): 565~567 (Li Yinshi, He Yaling, Sun Jie, et al. Molecular dynamics simulation study on flow around a circular cylinders in microscale. *Journal of Engineering Thermophysics*, 2007, 28(4): 565~567(in Chinese))

STUDY ON FLOW PAST A NANO CIRCULAR CYLINDERS WITH DIFFERENT REYNOLDS NUMBERS¹⁾

Li Yinshi He Yaling²⁾ Sun Jie Tao Wenquan

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

Abstract The steady cross-flow past a circular cylinder in the low Reynolds numbers was investigated using non-equilibrium molecular dynamics simulations with the Lennard-Jones potential. The results showed three basic flow patterns in microscale, different from those in macroscale. The flow behind the circular cylinder is symmetric, nonseparated and steady when $Re < 12$. Periodic shedding and the oscillation of vortices are observed when $Re > 20$. When the stream velocity is higher than the local sound speed, a cavity in the downstream adjacent to the cylinder forms. Asymmetric vortices appears as a transitional range when $12 < Re < 20$. The scale effect has been shown with the different flow pattern regions of Re between present work and the macroscopic results.

Key words molecular dynamics, flow past a circular cylinder, vortex

Received 23 April 2007, revised 22 October 2007.

1) The project supported by the National Basic Research Program of China (2007CB206902) and the National Natural Science Foundation of China (50629601).

2) E-mail: yalinghe@mail.xjtu.edu.cn