

介观尺度流体绕流球体的耗散粒子动力学模拟*

常建忠¹⁾ 刘汉涛^{1)†} 刘谋斌²⁾ 苏铁熊¹⁾

1) (中北大学机电工程学院, 太原 030051)

2) (中国科学院力学研究所, 北京 100190)

(2011年6月10日收到; 2011年7月12日收到修改稿)

采用耗散粒子动力学 (dissipative particle dynamics, DPD) 方法, 对两平行平板间流体绕流三维球体进行了计算. 球体和平行平板由达到平衡状态的冻结 DPD 粒子组成, 流体在不同无量纲外力驱动下流动, 球体受力由组成球体的所有冻结 DPD 粒子求和得到. 流动达到充分发展后, 输出球体在流动方向的受力, 并计算球体的阻力系数, 与文献中的关联式进行了对比. 结果表明, 在 $Re \leq 100$ 的范围内, DPD 方法能较准确地计算出阻力系数, 在较大雷诺数时, 由于流体的压缩性导致计算结果出现差异.

关键词: 介观尺度, 耗散粒子动力学, 阻力系数

PACS: 47.61.-k, 47.11.-j

1 引言

微观及介观尺度下的多相流动广泛存在于自然界和工业设备中^[1,2,3]. 多相流动颗粒阻力系数的计算在工程应用中具有重要的研究价值, 可以通过理论分析、经验或半经验公式得到其估计值^[4,5]. 基于连续介质的计算方法, 如欧拉-欧拉模型、欧拉-拉格朗日模型, 很难捕捉系统温度效应, 壁面滑移条件、颗粒相的受力关系和其应力封闭, 也还没有一个完善的理论, 采用了一些简化和假设, 也不能刻画流场内部流动的细节. 由于物理上和数学上的许多困难, 目前还不能使用从分子运动论出发的微观分析法来处理两相流动的实际问题. 介于纳米和毫米之间的介观尺度模拟方法已逐渐形成, 如直接数值模拟 (direct numerical simulation, DNS)、网格玻尔兹曼方法 (lattice Boltzmann method, LBM)、光滑粒子动力学方法 (smoothed particle hydrodynamics, SPH)、耗散粒子动力学方法 (dissipative particle dynamics, DPD) 等. DNS 方法将计算网格缩小到颗粒尺寸以下进行流动计算, 颗粒占据有限体积, 颗粒受力不通过模型计算, 而是通过积分表面的黏性力和压力获得, 已经应用于上千个颗粒的流态化过程的计算^[6-8]. 但在计算

中, 每一个时间步长内都需要对整个计算域进行网格的重新划分, 基于网格的计算方法造成了较大的计算量; LBM 方法已成功应用于多种微尺度问题的模拟中, 但处理动态变形边界问题仍是网格方法的局限^[9]; SPH 方法目前已逐渐推广到传统连续力学所适用的领域, 有望进一步应用于微尺度下非连续介质的运动特性^[10,11]; DPD 方法中流体粒子由一系列性质相同的粒子组成, 这些粒子代表若干分子, 既可以用作分子动力学模型, 也可以当做粗粒化的分子动力学方法, 目前已广泛应用于复杂流体问题的研究中, 如聚合物、高分子溶液、胶体、相分离及多相流的模拟^[12,13].

耗散粒子动力学是由 Hoogerbrugge 和 Koelman^[14] 在研究悬浮时引入的, 最初是为了开发 lattice-gas 方法在计算流体动力学方面的优势, 同时避免被定义在格子上的问题^[15,16]. 它结合了分子动力学、格子气自动机和格子-玻尔兹曼方法的优点. 为了维持系统温度不变, Espanol^[13] 发现耗散力系数和随机力系数以及耗散力权函数和随机力权函数必须满足一定的关系, 并与 Marsh 等^[17] 奠定了它的统计动力学基础. 在 Espanol 和 Warren 对 DPD 方法改进前, Hoogerbrugge 和 Koelman 最初研究了蠕动流体流过一个固定圆柱方阵列时, 圆

* 国家自然科学基金 (批准号: 50976108) 资助的课题.

† E-mail: lht@nuc.edu.cn

柱受到的曳力, 并与 Sangani 和 Acrivos^[18] 的曳力进行了对比, 但其研究局限于流体流速很低的情况, 流动中惯性效应可以忽略. Boek 等^[19] 计算了悬浮的球体、杆、圆盘的黏性. Espanol 和 Warren 对 DPD 方法进行修正后, 所得出的新的算法被广泛采用. Boek Schoot^[20] 采用 DPD 方法对流体流过周期性圆柱阵列进行了研究, 结果表明在介观尺度下可以定量得到无量纲曳力, 为检验 DPD 模拟有限雷诺数流动的可行性, Chen 等^[21]、Kim 和 Philips^[22] 对流体流过球体和圆柱体进行了计算, 结果表明在有限雷诺数下能准确模拟流动问题, 在高雷诺数下, 由于流体的可压缩性导致计算不准确.

本文采用耗散粒子动力学方法, 通过经典的 Poiseuille 流动模拟问题验证了方法的可行性和准确性, 对三维球体在平行平板间的流动进行了计算, 得到了较宽雷诺数范围内的颗粒阻力系数, 并与经典的经验公式进行了对比.

2 DPD 方法及参数

文中 DPD 方法的基本思想、控制方程及数值方法可参见文献 [12, 23], 本文中采用的耗散力权函数和随机力权函数的形式为

$$w^D(r) = [w^R(r)]^2 = \begin{cases} (1 - r/r_c)^{1/2} & r < r_c, \\ 0 & r \geq r_c, \end{cases} \quad (1)$$

其中, r_c 为截距, 粒子 - 粒子间的两两相互作用力局限在有限的截距内. 耗散力权函数和随机力权函数采用上述形式时, 与传统平方形式的权函数 $(1 - r/r_c)^2$ 相比, 可以提高系统的施密特数, 根据 Groot 和 Warren 的研究^[24], 经过适当推导, 可以得到 DPD 系统的动力学参数为:

扩散系数

$$D = \frac{315k_B T}{64\pi\gamma\rho r_c^3};$$

动力黏度

$$\eta = \frac{\rho D}{2} + \frac{512\pi\gamma\rho^2 r_c^5}{51975};$$

施密特数

$$Sc = \frac{1}{2} + \frac{(2\pi\gamma\rho r_c^4)}{1999k_B T}.$$

控制方程中采用的 DPD 参数及系统参数如表 1 所示. 计算采用修正的 Velocity-Verlet 算法^[23] 进行时间积分, 时间步长取 0.02. 对输出的计算结果, 如粒子坐标、速度、压力、密度、温度等, 将 x

方向等分为 20 个格子, z 方向等分为 200 个格子, 每 400 个时间单位对各格子里的数据进行抽样平均, 并输出.

表 1 模拟计算中的 DPD 参数

模拟参数	符号	参数值
流体密度	ρ	4
保守力系数	a	18.75
耗散力系数	γ	4.5
随机力系数	δ	3.0
系统温度	$k_B T$	1
扩散系数	D	0.087
动力黏度	η	2.4
施密特数	Sc	6.89

3 Poiseuille 流动问题

Poiseuille 流动问题中, 两平行平板间静止流体受到 x 方向、大小为 $g = 0.02$ 的无量纲外力驱动, 开始流动. 模拟区域在 $-30 \leq x \leq 30$, $-1.5 \leq y \leq 1.5$, $-15 \leq z \leq 15$, 在 x 、 y 方向施加周期性边界条件, 在 $z = 15$, $z = -15$ 平面布置固壁粒子. 固壁粒子和流体粒子按照面心立方体方式布置, 在流动区域粒子数为 21240, 壁面粒子数为 2160. 通过 Poiseuille 流动问题的计算可以验证程序的可靠性和准确性.

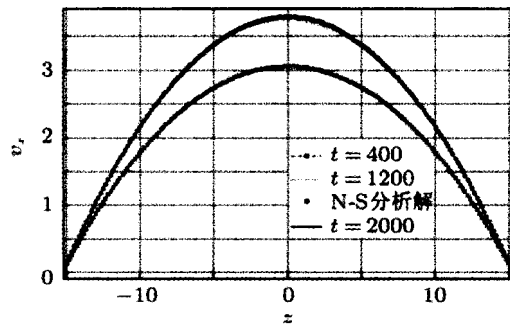


图 1 沿高度方向的速度剖面

平板间不同时间单位的速度剖面如图 1 所示, 从图中可以看出, 在 1200 个时间单位后, 流场已经达到充分发展阶段, 速度剖面不再变化. 如果流体为牛顿流体, 则速度剖面 N-S 方程解析解为

$$V_x = 3.75 \left[1 - \left(\frac{z}{15} \right)^2 \right], \quad (2)$$

与 1200 个时间单位的速度剖面完全一致, 在固体壁面附近速度基本为零, 实现了无滑移的速度边界条件. 图 2 中显示的温度与给定的系统温度 $k_B T = 1$ 基本一致, 粒子密度沿高度的分布情况

与初始设定的粒子密度 $\rho = 4$ 也一致. 图 3 为计算的剪切应力与分析解的对比, 可以看出, 除壁面附近, 虽然 DPD 计算的剪切应力有波动, 但在整个区域内总体趋势和平均值与理论解完全一致. 边界粒子密度、温度、剪切应力等的波动在 DPD 模拟中是一个普遍的现象, 与 DPD 方法本身有关, 不少学者研究了其原因并提出了一些改进措施 [23].

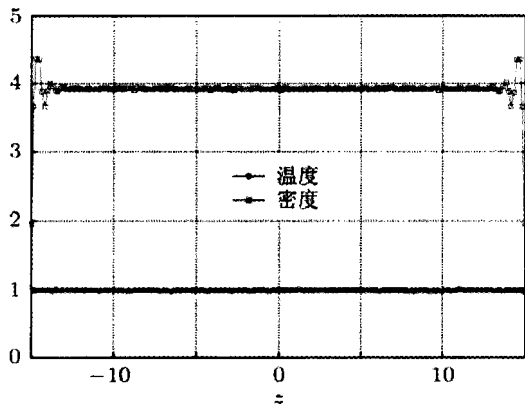


图 2 沿高度方向的温度与密度分布

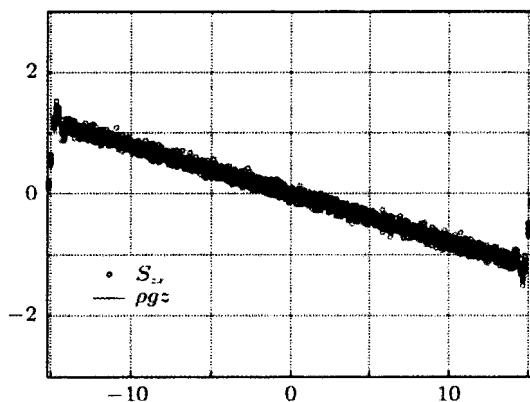


图 3 Poiseuille 流动中剪切应力分布

4 流体绕流三维球体的阻力系数

两平行平板包含的流动区域为 $-50 \leq x \leq 50$, $-8 \leq y \leq 8$, $-20 \leq z \leq 20$, 模拟区域在 x, y 方向施加周期性边界条件, $z = -20, z = 20$ 平面布置固定壁粒子. 在流动区域 $x = 0, y = 0, z = 0$ 的位置, 固定一半径为 2.8 的静止圆球, 平行平板由 12000 个固定粒子组成, 圆球由 384 个固定粒子组成, 初始时刻平板间由 145616 个静止流体粒子按照面心立方体方式布置. 对流体粒子在 x 方向施加不同大小的无量纲外力 g 驱动, 可以获得不同 Re 的流动, 当流动达到充分发展后, 输出 1200 个时间单位、

约 8.4×10^4 步时的球体受力, 球体的受力由组成所有球体的固定粒子的受力求和得到.

在流体绕流球体时, 在流动方向上球体所受的曳力可表示为

$$F_D = \frac{1}{2} C_D A \rho_f U |U|, \quad (3)$$

其中, C_D 为阻力系数; A 为垂直于流动方向上的截面面积; ρ_f 为流体密度; U 为在 x 方向上, 球体相对于流体的运动速度.

当流动达到充分发展后, 颗粒的曳力通过对球体内部所有粒子在 x 方向的受力求和得到, 在本问题中 (3) 式还可以写为

$$F_D = \frac{1}{8} C_D \pi d^2 \rho_f U |U|, \quad (4)$$

根据 (4) 式可以得到球体阻力系数 C_D .

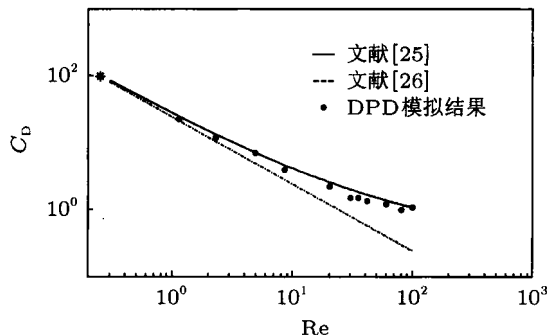


图 4 不同雷诺数时球体的阻力系数

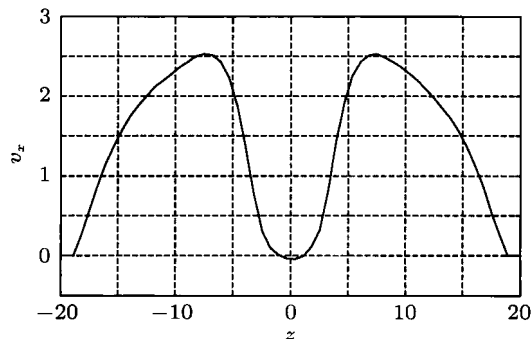


图 5 垂直颗粒中心位置速度剖面

在流体速度较低的蠕流流动中, 惯性力可以忽略, 球体阻力系数可由 Batchelor [25] 得到

$$C_D = \frac{24}{Re}. \quad (5)$$

此外, 根据 Brown 和 Lawler [26] 的实验关联式, 在 $Re \leq 2 \times 10^5$ 的范围内, 阻力系数 C_D 为

$$C_D = \frac{24}{Re} (1 + 0.150 Re^{0.681}) + \frac{0.407}{1 + (8710/Re)}. \quad (6)$$

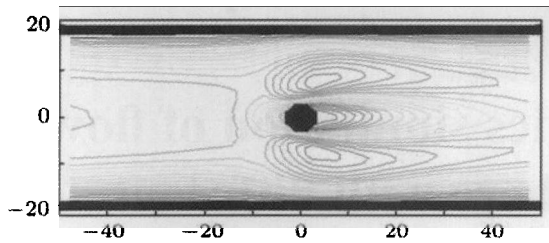


图6 颗粒周围流场流线

将本文 DPD 方法计算的结果与 (5) 式和 (6) 式的结果绘于图 4 中. 从图中可以看出, 在 $Re \leq 100$ 的范围内, DPD 方法计算的阻力系数与 (5) 式和 (6) 式很符合, 表明 DPD 方法能有效模拟 Re 较低时的流动问题, 在介观尺度的流动中, 流体的雷诺数一般较低, 因此 DPD 方法可以有效地模拟介观尺度下的流动问题. 在雷诺数较高时, 由于流体的压缩效应导致计算结果出现了差异. 图 5 为垂直球体中间截面的速度剖面, 由于沿 z 方向分了 200 个格子对

结果进行平均, 因此在粒子周围速度并不为 0, 但可以看出在靠近粒子时速度逐渐递减. 图 6 为颗粒周围流场流线, 在 Re 较低时, 颗粒尾部没有涡出现.

5 结论

对流体绕流三维球体进行了耗散粒子动力学计算, 并分别通过 Poiseuille 流动问题和经典关联式进行了对比验证, 得到了球体周围流线, 速度分布. 对流体采用不同的无量纲外力驱动, 得到不同雷诺数下的流动, 并计算了流动达到充分发展后, 阻力系数随雷诺数变化的规律. 结果表明, 在一定雷诺数范围内, DPD 方法能准确地计算出阻力系数, 在较大雷诺数时, 由于流体的压缩性导致计算结果出现差异. 为研究介观尺度下颗粒两相流动提供了一种新的方法.

- [1] Zheng G B, Jin N D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4485 (in Chinese) [郑桂波, 金宁德 2009 物理学报 **58** 4485]
- [2] Hao P F, Yao C H, He F 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 4728 (in Chinese) [郝鹏飞, 姚朝晖, 何枫 2007 物理学报 **56** 4728]
- [3] Liu M B, Meakin P, Huang H 2007 *J. Comput. Phys.* **222** 110
- [4] Cheng N S 2009 *Powder Technology* **189** 395
- [5] Gabitto J, Tsouris C 2008 *Powder Technology* **183** 314
- [6] Feng J, Joseph D D 1995 *J. Fluid Mech.* **303** 83
- [7] Liu H T, Tong Z H, An K, Ma L Q 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6369 (in Chinese) [刘汉涛, 全志辉, 安康, 马理强 2009 物理学报 **58** 6369]
- [8] Liu H T, Chang J Z, An K, Su T X 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1877 (in Chinese) [刘汉涛, 常建忠, 安康, 苏铁熊 2010 物理学报 **59** 1877]
- [9] Lim C Y 2002 *Phys. Fluids A* **14** 2299
- [10] Monaghan J J 1992 *Ann. Rev. Astron. Astrophys.* **30** 543
- [11] Liu M B, Liu G R 2010 *Arxiv. Comput. Methods Engrs.* **17** 25
- [12] Chang J Z, Liu M B, Liu H T 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3954 (in Chinese) [常建忠, 刘谋斌, 刘汉涛 2008 物理学报 **57** 3954]
- [13] Espanol P 1995 *Phys. Rev. E: Stat. Phys. Plasmas Fluid* **52** 1734
- [14] Hoogerbrugge P J, Koelman J 1992 *Europhys. Lett.* **19** 155
- [15] Koelman J, Hoogerbrugge P J 1993 *Europhys. Lett.* **21** 363
- [16] Revenga M, Zuniga I, Espanol P 1999 *Compt. Phys. Comm.* **121** 309
- [17] Marsh C A, Backx G, Ernst M H 1997 *Phys. Rev.* **56** 1676
- [18] Sangani A S, Acrivos A 1982 *International Journal of Multiphase Flow* **8** 193
- [19] Boek E S, Coveney P V, Lekkerkerker H N W 1996 *Journal of Physics- Condensed Matter* **8** 9509
- [20] Boek E S, Schoot P 1998 *Int. J. Mod. Phys. C* **9** 1307
- [21] Chen S, Phan-Thien N, Khoo B C, Fan X J 2006 *Phys. Fluids* **18** 103605
- [22] Kim J M, Phillips R J 2004 *Chem. Eng. Sci.* **59** 4155
- [23] Liu M B, Chang J Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 7556 (in Chinese) [刘谋斌, 常建忠 2010 物理学报 **59** 7556]
- [24] Groot R D, Warren P B 1997 *J. Chem. Phys.* **107** 4423
- [25] Batchelor G K 1967 *An Introduction to Fluid Dynamics* (Cambridge: Cambridge University Press) p120
- [26] Brown P P, Lawler D F 2003 *J. Environ. Eng.* **129** 222

Dissipative particle dynamics simulation of flow around a mesoscopic sphere with different Reynolds numbers*

Chang Jian-Zhong¹⁾ Liu Han-Tao^{1)†} Liu Mou-Bin²⁾ Su Tie-Xiong¹⁾

1) (School of Mechatronic Engineering of North University of China, Taiyuan 030051, China)

2) (Key Laboratory for Hydrodynamics and Ocean Engineering, of Institute of Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China)

(Received 1 June 2011; revised manuscript received 1 July 2011)

Abstract

Dissipative particle dynamics (DPD) is used to investigate the flow passing through a three-dimensional sphere within two parallel plates. The sphere and the plates are composed of frozen DPD particles which are in an equilibrium state. The fluid is driven by a dimensionless external force exerting on each fluid particle. The force on the sphere is computed from the total particles constituting the sphere. After the flow is fully developed, the obtained results, including the force exerted on the sphere is computed, and then we can calculate the drag coefficient. The accuracy and the reliability are compared with classical results. The results show that the DPD method can predict drag coefficient accurately when Re is less than 100. However, when Re is bigger than 100, the results deviate from analytical values, which is due mainly to the fluid compressibility.

Keywords: meso-scale, dissipative particle dynamics, drag coefficient

PACS: 47.61.-k, 47.11.-j

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 50976108).

† E-mail: lht@nuc.edu.cn