

基于基液连续假设的大体系 Cu-H₂O 纳米流体输运特性的模拟研究

何昱辰 刘向军

Simulation studies on the transport properties of Cu-H₂O nanofluids based on water continuum assumption

He Yu-Chen Liu Xiang-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 196601 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.196601

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.196601>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I19>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

多约束纳米结构的声子热导率模型研究

A model for phonon thermal conductivity of multi-constrained nanostructures

物理学报.2015, 64(14): 146501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.146501>

基于稳态电热拉曼技术的碳纳米管纤维导热系数测量及传热研究

Thermal characterization of carbon nanotube fibers based on steady-state electro-Raman-thermal technique

物理学报.2015, 64(12): 126501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.126501>

考虑界面散射的金属纳米线热导率修正

Thermal conductivities of metallic nanowires with considering surface and grain boundary scattering

物理学报.2013, 62(18): 186501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.186501>

非简谐振动对纳米金刚石表面性质的影响

The influence of anharmonicity on the surface effect in nanodiamond

物理学报.2012, 61(10): 106501 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.106501>

聚对苯撑/LiNi_{0.5}Fe₂O₄ 纳米复合热电材料的制备及其性能研究

Study on the preparation and properties of polyparaphenylene/LiNi_{0.5}Fe₂O₄ anocomposite thermoelectric materials

物理学报.2012, 61(7): 076502 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.076502>

基于基液连续假设的大体系Cu-H₂O纳米流体 输运特性的模拟研究*

何昱辰 刘向军†

(北京科技大学机械工程学院, 北京 100083)

(2014年12月29日收到; 2015年5月20日收到修改稿)

分子动力学模拟是研究纳米流体的输运特性的重要手段, 但计算量庞大. 为研究能体现流动传热过程的大体系纳米流体的输运特性, 本文对基液采用连续介质假设, 将基液的势能拟合在纳米团簇的势能中, 大幅度减小了计算量, 使得大体系输运特性的模拟成为可能, 且模拟结果与多组实验结果吻合较好. 采用此方法模拟研究了速度梯度剪切对Cu-H₂O纳米流体颗粒聚集过程和聚集特性的影响, 进而对Cu-H₂O纳米流体在流动传热过程中的热导率和黏度进行了模拟计算, 定量揭示了宏观流动传热过程中不同的速度梯度、速度、平均温度和温度梯度对于Cu-H₂O纳米流体热导率和黏度的影响.

关键词: 纳米流体, 分子动力学模拟, 输运特性, 聚集

PACS: 66.20.Cy, 65.80.-g, 47.11.Mn

DOI: 10.7498/aps.64.196601

1 引言

纳米流体是指以一定方式在液体介质中添加纳米级金属或金属氧化物颗粒而形成的悬浮液, 能显著提高传热效率^[1], 其应用与发展的研究目前广受关注^[2,3]. 纳米流体的输运性质是纳米流体深入发展和应用的基础与前提.

国内外研究者对颗粒浓度、大小、温度等参数对纳米流体输运特性的影响研究进行了大量研究^[4-6]. 与一般传热工质不同, 纳米流体本身为不稳定的固液混合物, 纳米流体所呈现的宏观输运特性是物质内部静态和动态运输的综合体现, 且大部分情况下纳米粒子与基液之间微流动引起的动态运输是影响纳米流体宏观输运特性的更重要因素^[7,8]. 流动传热过程中外部作用使得纳米颗粒之间以及基液与纳米颗粒之间的作用发生变化^[9], 内部动态特性发生改变, 其表现出的输运特性必然有不同程度的变化, 研究流动传热过程中纳米流体的输运特性对纳米流体的发展和应用更具实际意

义^[10]. 而现阶段对此部分的研究较为匮乏.

分子动力学模拟(MDS)方法^[11]是目前公认可深入定量研究纳米流体输运特性的重要手段, 国内外不少研究者采用MDS方法对不同纳米流体的输运特性进行了研究. 如Gianluca Puliti^[12]用分子动力学方法对Au-H₂O纳米流体的热导率和黏度进行了研究, Kumar等^[13]对298 K温度下氯化锂在不同基液中的黏度做了模拟研究, Chen等^[14]采用分子动力学方法计算了碳纳米管水溶液的黏度和扩散系数, Lin等^[15]模拟计算了乙醇-铜纳米流体的导热系数, Cui等^[16]模拟计算了多种不同材料、不同体积浓度和不同形状纳米颗粒的纳米流体导热系数. 上述分子动力学模拟研究得到了较为满意的结果. 然而, MDS方法的计算量随分子个数成几何倍数关系, 受到计算机的计算能力限制, 现有的研究都是针对模拟区域和体积分数很小的情况, 纳米粒子大小一般为1—5 nm. 若研究对象为实际应用的粒径为几十纳米以上纳米流体, 或进一步对存在宏观流动传热过程的纳米流体体系进行

* 中央高校基本科研业务费专项资金(批准号: FRF-SD-12-007B)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: liuxj@ustb.me.edu.cn

模拟, 研究体系大, 所包含分子数极大, 采用常规的全原子分子动力学方法研究能体现宏观流动传热的大体系的纳米流体的输运特性在目前是难以实现的. 文献 [17] 将基液水分子粗粒化, 在计算精度与全原子模拟相当情况下将计算量减小到 1/20, 模拟研究了 Cu-H₂O 纳米流体的黏度特性, 但此方法用于研究能体现宏观流动传热的大体系的纳米流体的输运特性仍难以实现.

另一方面, 随着研究体系的增大, 纳米流体基液分子数增多, 体系大到一定尺度, 连续介质假设可以用于描述基液的特性. 若将基液视作连续相, 纳米颗粒视作离散相, 将纳米体系的作用势拟合至金属纳米颗粒中的相互势能中, 仅计算纳米颗粒之间的相互作用势能, 在保证精度的条件下能更大幅度提高计算效率. 前人的研究中已经论证过类似问题 [18–20], 如文献 [18] 采用此方法研究了 Cu-乙炔纳米流体中粒子的布朗运动特性, 进而研究了 Cu-乙炔纳米流体的热导率; 文献 [19] 和文献 [20] 等采用此方法研究了胶体粒子在静电力场和磁场作用下的布朗运动特性. 上述研究都得到了较为满意的结果.

本文以 Cu-H₂O 纳米体系为研究对象, 将 Cu-H₂O 纳米体系的作用势拟合至 Cu-Cu 原子之间, 基于实验数据得到作用势参数, 研究了 Cu-H₂O 纳米流体在流动过程中的粒子运动与聚集过程, 进而从平衡态分子动力学出发, 通过 Green-Kubo 公式 [21] 对存在宏观速度梯度和温度梯度的纳米流体热导率和黏度进行了数值模拟, 考察了速度梯度、宏观速度、温度和温度梯度对于 Cu-H₂O 纳米流体热导率和黏度的影响.

2 研究对象与研究方法

2.1 研究对象与模型构建

为研究流动传热过程对纳米体系输运特性的影响, 本文以 Cu-H₂O 纳米流体为研究对象, 模拟体系大小为 149.644³ nm³ 和 299.288³ nm³ 两种, 对于基液水, 努森数 Kn 远小于 0.001, 可采用连续介质假设. 体系中包含有 4–64 个 Cu 纳米颗粒, 颗粒直径为 20 nm, 与实际纳米流体的颗粒大小相符, 大大超过一般分子动力学模拟的颗粒大小. 体系中的 Cu 原子总数达到 1419680–22714880 个, 本文采用的 Cu 纳米颗粒都是球形颗粒, 各个边界采用

周期性边界条件, 图 1 为含有 8 个 Cu 纳米颗粒的纳米流体体系物理模型.

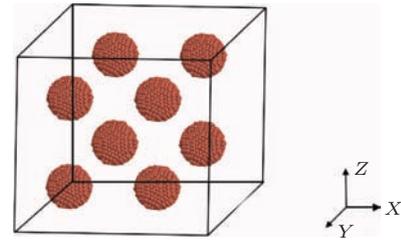


图 1 连续假设模拟的 Cu-H₂O 纳米流体体系物理模型
Fig. 1. Physical model of Cu-H₂O nanofluid based on fluid continuum assumption.

2.2 初始条件与模拟方法

初始时刻纳米颗粒内 Cu 原子按面心立方晶格构型排布. 初始平动速度按照 Maxwell 分布随机取值, 初始转动速度取为零, 初始运动方位为随机取向, 对速度进行标定, 使体系的总动量为零. 采用蛙跳格式 (Leapfrog-Verlet) 算法来数值积分运动方程. 程序中 Cu-Cu 原子间的相互作用势 U_{ij} 采用 Lennard-Jones 势函数 [22], 表示为

$$U_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

式中, r_{ij} 是原子之间的距离, σ 和 ϵ 分别为势能函数的尺寸和能量参数. 本文采用拟合的方法将 H₂O 的势函数拟合进了 Cu 纳米颗粒中原子的势函数中. 参与拟合的物理模型为图 1 所示, 拟合之后的 Cu-Cu 原子间势函数参数如表 1 所示.

表 1 Cu-Cu 原子之间的 LJ 势能参数
Table 1. Potential parameters for Cu-Cu atoms.

粒子 1	粒子 2	ϵ/eV	$\sigma/\text{\AA}$
Cu	Cu	6.626	2.3375

基于平衡态分子动力学 (EMD), 纳米流体热导率 k 可通过积分微观热流量的自相关函数得到 [11], 其 Green-Kubo 公式计算如下:

$$k = \frac{1}{3k_BVT} \int_0^\infty \langle \mathbf{J}_q(0) \mathbf{J}_q(t) \rangle dt, \quad (2)$$

式中, V 是体积, T 是温度, k_B 是波尔兹曼常数, \mathbf{J}_q 是微观热流矢量, 式中尖括号表示总体平均, 即取模拟计算总时间的平均值. $\langle \mathbf{J}_q(0) \mathbf{J}_q(t) \rangle$ 是热流自相关函数. 热流矢量 \mathbf{J}_q 计算为 [23]

$$\mathbf{J}_q = \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i \left[\frac{1}{2} m_i v_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N U_{ij} - h \right], \quad (3)$$

式中, N 为系统中计算的粒子总数, h 是每个粒子的焓值, \mathbf{r}_i 是粒子 i 的位置矢量, m_i 是粒子 i 的质量, \mathbf{v}_i 是粒子 i 的速度, U_{ij} 是粒子 i 和粒子 j 间的对势.

纳米流体动力黏度系数 η 可用 Green-Kubo 公式计算如下:

$$\eta = \frac{V}{k_B T} \int_0^\infty \langle P_{ln}(0) \cdot P_{ln}(t) \rangle dt, \quad (4)$$

其中 P_{ln} 为张量 \mathbf{P} 的 l 和 n 方向分量 ($l \neq n$). 其定义如下 [23]:

$$P_{ln} = \frac{1}{V} \left(\sum_{i=1}^N m_i v_i^l v_i^n - \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=1}^N \frac{r_{ij}^l r_{ij}^n}{r_{ij}} \frac{\partial U_{ij}}{\partial r_{ij}} \right), \quad (5)$$

式中, r_{ij}^l 为第 i 个分子和第 j 个分子的位移矢量在 l 方向的分量, 其中 $l = x, y, z$; v_i^l 为第 i 个分子 l 方向的速度分量.

计算中时间步长取为 0.02 ps, 本文的模拟计算的总时间最少为 240 万时间步, 平衡前 400000 步采用 NVT 系综对温度进行矫正, 平衡后采用 NVE 微正则系综对数据进行统计, 用于计算热导率和黏度. 所有模拟计算基于 lammmps 模拟软件开发完成.

3 模型验证

为寻求合适的势函数参数并验证模型的正确性, 本文首先以体积分数 1%, 温度 293 K, 粒径为 20 nm 的 Cu-H₂O 纳米流体体系为基础条件进行了模拟计算, 体系大小为 299.288³ nm³, 含有 64 个 Cu 纳米颗粒. 经过多次拟合计算之后取势能函数参数 $\epsilon = 6.62$ eV, $\sigma = 0.23375$ nm, 计算所得 Cu-H₂O 纳米流体热导率和动力黏度系数随模拟时间的变化如图 2 所示, 体系在 20 ns 左右已经收敛, 所得 Cu-H₂O 纳米流体热导率和动力黏度系数分别是 0.62991 W/(m·K) 与 1.13031 mPa·s, 而对应条件下文献 [24—26] 所得热导率和动力黏度系数的实验测量值为 0.6450 W/(m·K) 和 1.15 mPa·s, 相对误差分别是 2.34% 和 1.71%.

为进一步验证模型的正确性, 本文对多条件下 Cu-H₂O 纳米流体的热导率和黏度进行了模拟计算, 并与文献 [24—26] 的实验值进行了对比, 结果如表 2 和表 3 所示, 表 2 所示为粒径 20 nm, 不同温度和体积分数条件下热导率实验数据与模拟数据对比, 表 3 为粒径 20 nm, 不同体积分数条件下

动力黏度系数实验数据与模拟数据对比, 由表 2 和表 3 可以看出, 在温度为 293 K 时, 纳米粒子的体积分数从 1% 增大到 3%, 模拟所得的热导率和动力黏度系数随体积分数增大而增大, 与实验结果变化趋势和变化幅度一致; 若体积分数保持为 1% 不变, 系统温度从 303 K 增大到 333 K, 模拟所得的热导率随温度增大而增大, 也与实验结果变化趋势和变化幅度一致. 模拟结果与实验结果吻合较好; 并且相对误差都在 5% 以内.

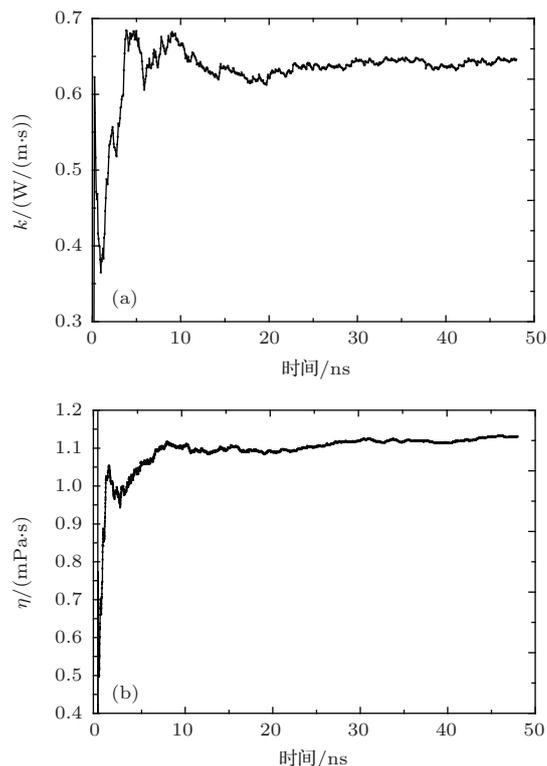


图2 Cu-H₂O 纳米流体热导率和动力黏度系数随模拟时间的变化

Fig. 2. Variation of thermal conductivity and dynamic viscosity coefficient of Cu-H₂O nanofluid with time.

表2 不同条件下纳米流体热导率实验数据与模拟数据对比

Table 2. Comparison of the calculated and experimental values for thermal conductivity of Cu-H₂O nanofluids under different conditions.

条件	实验值 k /(W/(m·K))	模拟值 k /(W/(m·K))	相对误差/%
293 K, 1%	0.6450 [24]	0.62991	2.34
293 K, 2%	0.7116 [24]	0.72875	2.41
293 K, 3%	0.7679 [24]	0.78813	2.63
303 K, 1%	0.700 [25]	0.68671	1.90
313 K, 1%	0.739 [25]	0.77442	4.79
323 K, 1%	0.775 [25]	0.79435	2.50
333 K, 1%	0.815 [25]	0.82525	1.26

表3 不同条件下纳米流体动力黏度系数实验数据与模拟数据对比

Table 3. Comparison of the calculated and experimental values for dynamic viscosity coefficient of Cu-H₂O nanofluids under different conditions.

条件	实验值 η / (mPa·s)	模拟值 η / (mPa·s)	相对误差/%
293 K, 1%	1.15 [26]	1.13031	1.71
293 K, 2%	1.6 [26]	1.67244	4.53
293 K, 3%	2.35 [26]	2.47853	5.47

上述结果表明, 本文所采用的模型与参数对大体系纳米流体输运特性的模拟是可行的.

4 模拟结果与分析

采用上述研究方法, 针对本文所确立的较大体系研究对象, 本文研究了内部速度梯度对纳米粒子聚集过程的影响, 进而研究了内部速度梯度、宏观流动速度、体系平均温度和内部温度梯度对于纳米流体输运特性的影响.

4.1 速度梯度对于粒子聚集特性的研究

纳米流体属热力学上的不稳定物系. 纳米粒子的比表面积大, 粒子表面的活性极高, 粒子很容易团聚在一起, 而纳米粒子聚集会使体系输运特性发生改变甚至失去纳米流体的特征. 实际纳米流体的分散稳定特性是其应用的一个重要指标. 本文首先针对不加任何分散剂情况下纳米流体在内部存在速度梯度时的粒子聚集特性进行了研究.

研究纳米流体存在内部速度梯度的聚集情况采用的条件为基础条件, 体系大小为 299.288^3 nm^3 , 含有 64 个粒径为 20 nm 的 Cu 纳米颗粒. 内部速度梯度由一定剪切率的 Couette 流来获得, Couette 流的物理模型如图 3 所示.

取剪切率为 10 s^{-1} 到 600 s^{-1} 共 15 个条件, 结果表明当剪切率小于 50 s^{-1} 时, 初始均匀分布的 64 个纳米粒子一般从 50 ns 起开始迅速聚集, 随着剪切率的增大, 聚集程度减弱. 图 4 为剪切率为 100 s^{-1} 某一时刻的聚集过程的局部放大图, 存在速度剪切情况下粒子聚集体一般不是以球形聚集体存在的, 而是不规则的链式形状. 这是由于单个纳米颗粒运动速率远远大于聚集体的平动和转动的运动速率, 这与其回转半径密切相关.

图 5 所示为计算所得 200 ns 后不同剪切率下颗粒的聚集个数和粒子团的当量直径. 当剪切率

小于 50 s^{-1} 时, 64 个粒子最终聚集为一个平均粒径为 80 nm 的大粒子团, 当剪切率为 $100\text{--}200 \text{ s}^{-1}$ 时, 在计算的 200 ns 内, 有半数以上的粒子与其他粒子聚集, 但一般是少量几个粒子聚集在一起, 体系的平均粒径为 26.14—25.38 nm, 随着剪切率的增大, 团聚效应减弱, 粒子趋向于分散, 颗粒团的当量直径在不断减小. 当剪切率为 $500\text{--}600 \text{ s}^{-1}$ 时, 在 200 ns 之内没有纳米颗粒聚集的情况发生, 表明高速度剪切给予体系的分散作用已经超过其内部粒子之间的聚集作用, 系统处于暂时稳定的状态而不聚集.

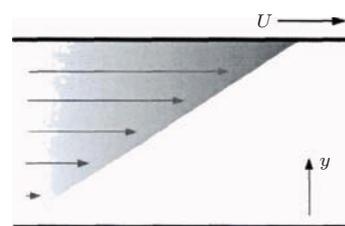


图3 Couette 流物理模型

Fig. 3. Physical model of Couette flow.



图4 某一时刻纳米颗粒的聚集过程的局部放大图

Fig. 4. Enlarged view of local aggregating process of nanoparticles.

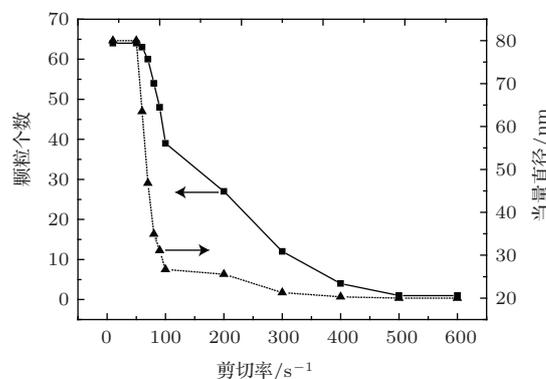


图5 纳米颗粒聚集个数和当量直径与剪切率的关系

Fig. 5. Calculated aggregating-nano-particle number and aggregation equivalent diameter against shear rate.

从图表中可以看出, 纳米颗粒在不加分散剂或者其他分散作用的情况下, 颗粒趋于聚集, 进一步计算表明, 在小于 40 s^{-1} 的低剪切作用下, 100 ns 的时间内往往能有超过半数颗粒不再处于单颗粒状态, 这也使得在实验研究纳米流体聚集过程中往往会遇到困难, 在制备稳定的纳米流体悬浮液时必须加入分散剂才能获得比较好的稳定性能.

4.2 速度梯度对于纳米流体运输特性的影响研究

为研究速度梯度剪切对纳米流体运输特性的影响, 本文针对体积分数为 $0.5\%—3\%$, 温度为 293 K , 粒径为 20 nm 的 $\text{Cu-H}_2\text{O}$ 纳米流体进行研究. 模拟体系大小为 149.644^3 nm^3 , 体系中包含 $4—24$ 个 Cu 纳米颗粒, 模型包含的 Cu 原子总数数为 $1419680—8518080$ 个.

4.1 节研究结果表明, 若不采用任何物理化学分散剂方法, 所研究的 $\text{Cu-H}_2\text{O}$ 纳米流体在内部速度梯度较小情况下 (小于 500 s^{-1}), 粒子都会发生不同程度的聚集, 而粒子的聚集又必然使得纳米体系的运输特性发生改变, 图 6 所示为体积分数为 1% , 剪切率 100 s^{-1} 时计算所得 $\text{Cu-H}_2\text{O}$ 纳米流体热导率随时间的变化, 图 7 为前 50 ns 的局部放大图, 从图 6 和图 7 中可以看出, 由于初始纳米粒子在体系内均匀分布, 随着时间的推移, 纳米流体热导率在 20 ns 先趋于平衡, 在 $20—50 \text{ ns}$ 保持一定的数值不变, 此段时间内纳米粒子都处于独立状况, 尚未发生聚集. 但 50 ns 后, 粒子开始聚集, 粒子团直径增大, 粒子微观运动减弱, 纳米流体热导率随时间的不断降低.

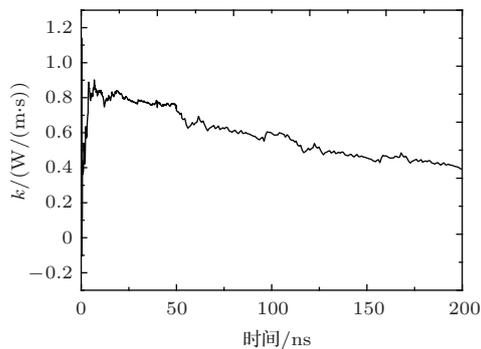


图 6 剪切率 100 s^{-1} 时热导率随时间的变化
Fig. 6. Variarion of thermal conductivity of $\text{Cu-H}_2\text{O}$ nanofluid with time when the shear rate is 100 s^{-1} .

需说明的是, 实际纳米流体在制备过程中都要采用一定的分散方法, 并且对于本文的研究对象,

由于初始纳米粒子在体系内均匀分布, 在本文的研究条件下, 纳米流体的运输特性都是在 20 ns 开始趋于平衡, 而最快是在 48 ns 才开始出现粒子聚集 (包括无剪切条件), 运输特性才出现改变. 为排除聚集团大小对运输特性的影响, 定量深入研究速度梯度、温度梯度等因素对于纳米流体运输特性的影响, 在后文的计算中, 运输特性的提取都是对 $20—48 \text{ ns}$ 时间段平均得到.

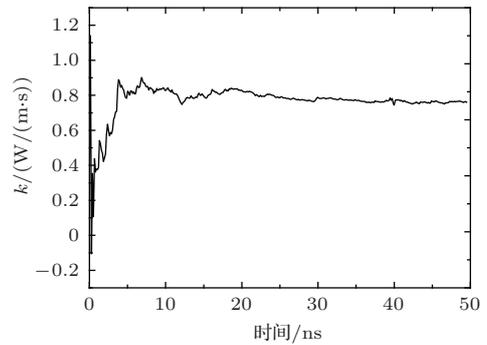


图 7 剪切率 100 s^{-1} 时热导率随时间的变化中局部趋势图
Fig. 7. Enlarged view of variation of thermal conductivity within the time interval of $0—50 \text{ ns}$.

图 8 和图 9 所示为模拟所得不同体积分数的纳米流体热导率和动力黏度系数随着剪切率变化的结果. 从图中可以看出, $\text{Cu-H}_2\text{O}$ 纳米流体的热导率随着剪切率的增加而增加, 但增加的趋势逐渐减小, 当速度剪切大于 200 s^{-1} , 热导率基本不再变化; 动力黏度系数随着剪切率的增加而减小, 并且减小的趋势也逐渐减小, 当速度剪切大于 300 s^{-1} 时, 动力黏度变化很小. 另外从图中可以看出, 随着粒子体积分数的增大, 热导率和黏度在剪切率为 $0—200 \text{ s}^{-1}$ 范围内变化程度增大, 这说明纳米流体的非牛顿特性随颗粒体积分数的增大而增强.

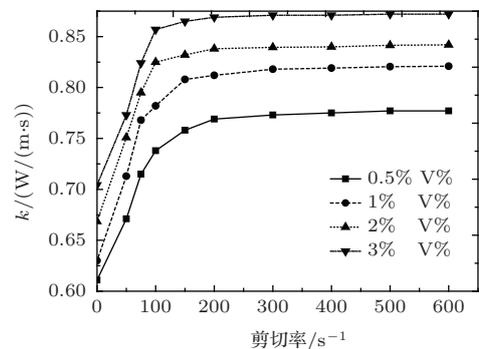


图 8 热导率随剪切率的变化
Fig. 8. Variation of thermal conductivity with shear rate.

可能的机理是因为: 剪切率的增加使得纳米颗粒的动能增加, 微运动强化, 这种微运动增加了颗

粒与颗粒之间的换热效率, 增大了纳米流体的导热系数; 另一方面, 剪切率的增加加强了颗粒的布朗运动, 使得粒子间相互吸引力相对减弱, 导致黏度下降, 并且加强的效果逐渐降低.

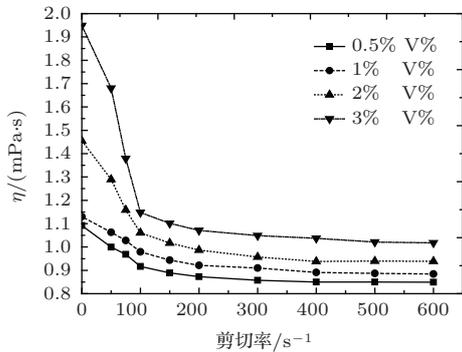


图9 动力黏度系数随剪切率的变化

Fig. 9. Variation of dynamic viscosity coefficient with shear rate.

4.3 宏观流动速度对于运输特性的影响研究

为研究体系宏观流动速度对纳米流体运输特性的影响, 本文在基础条件的基础上添加宏观流速进行了模拟计算, 具体方法是在纳米颗粒随机的布朗运动基础上增加恒定的 x 轴方向的速度, 速度范围为 0—30 m/s. 所得结果如图 10 所示.

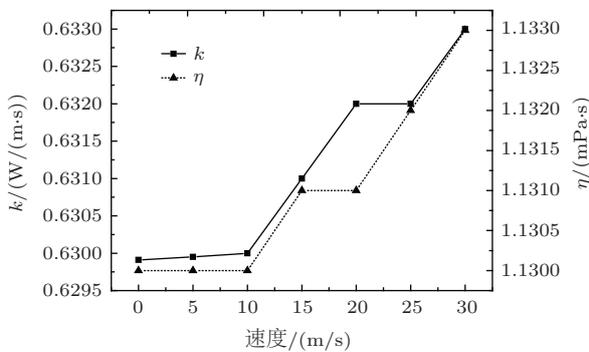


图10 热导率和动力黏度系数随流速的变化

Fig. 10. Variation of thermal conductivity and dynamic viscosity with flow velocity.

从图 10 可以看出, 体系流速从 0 变化到 30 m/s, 纳米流体的热导率和动力黏度系数增加, 但增加的幅度很小. 流速从 0 增加到 30 m/s, 热导率的增加率只有 0.46%, 动力黏度系数的增加率只有 0.26%, 实际过程中基本可忽略不计的. 出现这种现象的原因可以解释为: 存在宏观流动时, 纳米颗粒的能量有所增大, 运动加剧, 颗粒做布朗运动进行热交换和动量交换的程度加强, 导致热导率和

动力黏度有所增大, 但布朗运动瞬时速率远大于所研究条件的宏观速度, 外部宏观整体流动对粒子微观流动给予的能量有限, 因而增加幅度很小.

4.4 温度梯度和平均温度对于运输特性的影响研究

实际流动传热过程中纳米流体内部通常存在局部温度梯度, 研究局部温度梯度对于纳米流体运输特性的影响具有现实意义. 本文在基础条件的基础上添加温度梯度进行了模拟研究. 温度梯度的添加采用体分割方法, 将体系在 y 轴方向分割为 50 层, 每一层采用插值法设定不同的温度. 将最上层的一层设为高温层, 温度分别为 293 K, 297 K, 301 K, 305 K, 309 K, 313 K; 将最中间两层设为平均温度层, 均为 293 K; 为了剔除平均温度对于计算得到的运输特性的影响, 保证体系的平均温度均为 293 K, 将最下面一层分别设为 289 K, 285 K, 281 K, 277 K, 273 K, 其他层的温度按照温度梯度平均插值. 相应地, 折合作用在体系上的温度梯度分别是 0.266 K/nm, 0.2133 K/nm, 0.160 K/nm, 0.1067 K/nm, 0.0533 K/nm.

图 11 为平均温度为 293 K 时不同温度梯度下计算所得 Cu-H₂O 纳米流体的热导率和动力黏度系数, 随着温度梯度的增加, 纳米流体热导率增加, 而动力黏度系数减小. 这是因为: 温度梯度越大, 粒子之间相互运动的驱动力越大, 高温区粒子有向低温区运动的趋势, 增加了高温区粒子与低温区粒子的热交换, 从宏观上体现为热导率增加; 而粒子运动越剧烈, 克服阻力所消耗的能量也就越多, 从而使得纳米流体的黏度增大.

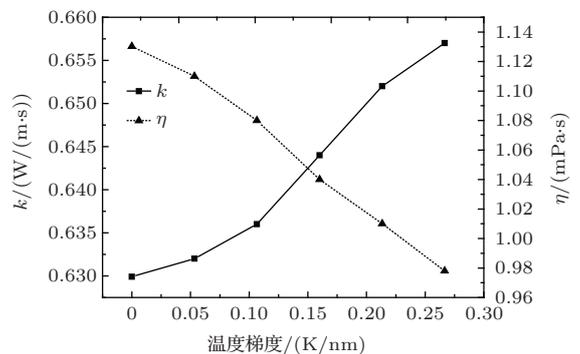


图11 热导率和动力黏度系数随温度梯度的变化

Fig. 11. Variation of thermal conductivity and dynamic viscosity with temperature gradient.

体系平均温度是影响运输特性的重要因素, 图 12 为计算所得不同平均温度下 Cu-H₂O 纳米流

体热导率和动力黏度系数,可以看出平均温度在小幅度变化的情况下纳米流体的热导率和黏度变化很大:平均温度从293 K增加到343 K,变化了17.1%,Cu-H₂O纳米流体热导率和动力黏度系数分别增大了34.5%和减小了58.2%。而图11结果表明,温度梯度从0.0533 K/nm到0.2666 K/nm,变化了400.2%,Cu-H₂O纳米流体热导率和动力黏度系数分别增大了3.96%和减小了11.9%。对比不同温度梯度下和不用系统平均温度下Cu-H₂O纳米流体热导率和动力黏度系数的变化,可见平均温度的变化是改变Cu-H₂O纳米流体热导率和动力黏度系数更重要的因素。另一方面,对于本文研究的温度梯度,其范围为0.0533—0.2666 K/nm,对于宏观体系其局部温度梯度是很大的数值,如0.0533 K/nm,即53.3 K/ μm 。如此大的温度梯度而引起的热导率和动力黏度系数的变化仅0.3%和1.7%,可见实际流动传热过程中温度梯度对于纳米流体运输特性的影响可忽略不计。

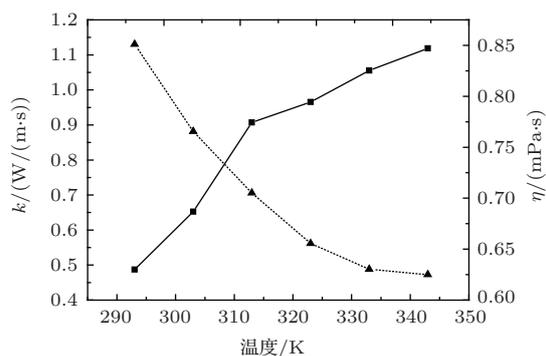


图12 热导率和动力黏度系数随温度的变化

Fig. 12. Variation of thermal conductivity and dynamic viscosity with temperature.

总结上述图表结果与分析:平均温度保持不变,对于本文计算范围内的非常大的温度梯度及其温度梯度变化范围,纳米流体热导率和动力黏度系数的变化幅度很小,温度梯度的影响实际过程中可忽略不计;对于本文所研究的相对不大的平均温度变化,引起的纳米流体的热导率和黏度的变化幅度则很大,平均温度是影响纳米流体运输特性的重要因素。

5 结 论

本文对Cu-H₂O纳米流体在流动传热过程中粒子聚集情况和热导率、动力黏度系数进行了数值模拟,采用了虚拟势函数的方法替代了原本水基液

的作用,大幅度减小了计算量,模拟的体系能够比一般分子动力学模拟能够大得多,使得大体系运输特性的模拟成为可能,且模拟结果与多组实验结果吻合较好。

流动和传热过程对于纳米流体的运输特性有着不可忽视的影响。本文对不同速度梯度剪切、不同宏观速度、不同温度梯度以及不同平均温度下的纳米流体热导率和动力黏度系数黏度进行了模拟。结果表明:纳米流体热导率随着剪切率的增加而增加,增加的趋势逐渐减小;动力黏度系数随着剪切率的增加而减小,减小的趋势也逐渐减小;随着流速的增加,纳米流体的热导率和动力黏度系数有小幅增加,在流速增加30 m/s时增加幅度在0.5%以下;保持平均温度不变,随着温度梯度的增加,纳米流体热导率增加而动力黏度系数减小,但在很大的温度梯度下运输特性的变化幅度很小,实际过程可忽略不计;平均温度较小的变化引起的纳米流体的热导率和黏度的变化幅度则很大,平均温度是影响纳米流体运输特性的重要因素。

参考文献

- [1] Xuan Y M, Li Q 2010 *Energy transfer theory and application of nanofluid*. (Beijing: Science Press) pp1–10 (in Chinese) [宣益民, 李强 2010 纳米流体能量传递理论与应用(北京: 科学出版社) 第1—10页]
- [2] Qi C, He G Y, Li Y M, He Y R 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 024703 (in Chinese) [齐聪, 何光艳, 李意民, 何玉荣 2015 物理学报 **64** 024703]
- [3] Hatat T, Imtiaz M, Alsaedi A, Mansoor R 2014 *Chin. Phys. B* **23** 054701
- [4] Li Y T, Shen L P, Wang H, Wang H B 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 124401 (in Chinese) [李屹同, 沈凉平, 王浩, 汪汉斌 2013 物理学报 **62** 124401]
- [5] Ling Z Y, Sun D J, Zhang Z Q 2013 *Journal of Functional Materials* **1** 92 (in Chinese) [凌智勇, 孙东健, 张忠强 2013 功能材料 **1** 92]
- [6] Lee J, Yoon Y J, Eaton J K 2014 *International Journal of Precision Engineering and Manufacturing* **15** 703
- [7] Beydokhti A K, Namaghi H A, Heris S Z 2013 *Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals* **64** 480
- [8] Khalili S, Dinarvand S, Hosseini R, Tamim H, Pop I 2014 *Chin. Phys. B* **23** 048203
- [9] Xiao B Q, Yang Y, Xu X F 2014 *Chin. Phys. B* **23** 026601
- [10] Ahmad A, Asghar S, Alsaedi A 2014 *Chin. Phys. B* **23** 074401
- [11] Frenkel D, Smit B 1996 *Understanding Molecular Simulation From Algorithms to Applications*(Cornwall: Academic Press) pp51–69

- [12] Gianluca Puliti 2014 *Ph. D. Dissertation* (Indiana: University of Notre Dame)
- [13] Kumar P, Varanasi S R, Yashonath S 2013 *J Phys. Chem. B* **117** 27
- [14] Chen X, Cao G X, Han A J 2008 *Nano Letters* **8** 2988
- [15] Lin Y S, Hsiao P Y, Chieng C C 2011 *Applied Physics Letters* **98** 153105
- [16] Cui W Z, Bai M L, Lv J Z, Li X J 2011 *Industrial & Engineering Chemistry Research* **50** 13568
- [17] He Y C, Liu X J 2014 *Chinese Journal of Theoretical and Applied Mechanics* **46** 871 (in Chinese) [何昱辰, 刘向军 2014 力学学报 **46** 871]
- [18] Bhattacharya P, S. Saha K, Yadav A 2004 *Journal of Applied Physic* **95** 6492
- [19] Melle S, Calderon O G, Rubio M A 2002 *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* **102** 135
- [20] Klingenberg D J, Van S F, Zukoski C F 1989 *J. Chem. Phys.* **91** 7888
- [21] Hansen J P, McDonald I R 1986 *Theory of Simple Liquids* (New York: Academic Press) pp238–302
- [22] Andry T, Jose A 1999 *J. Chem. Phys.* **18** 8510
- [23] Sarkar S, Selvam R P 2007 *Journal of Applied Physics* **102** 074302
- [24] Li Q 2003 *Ph. D. Dissertation* (Nanjing: Nanjing University of Science and Technology) (in Chinese) [李强 2003 博士学位论文 (南京: 南京理工大学)]
- [25] Li Q, Xuan Y M 2003 *Journal of Chemical Industry and Engineering* **54** 42 (in Chinese) [李强, 宣益民 2003 化工学报 **54** 42]
- [26] Wang B X 2000 *Heat Transfer science and Technology* (Beijing: Higher Education Press) pp757–762

Simulation studies on the transport properties of Cu-H₂O nanofluids based on water continuum assumption*

He Yu-Chen Liu Xiang-Jun[†]

(School of Mechanical Engineering, University of Science and Technology Beijing, Beijing 100083, China)

(Received 29 December 2014; revised manuscript received 20 May 2015)

Abstract

Nanofluid is a kind of new engineering medium which is created by dispersing small quantity of nano-sized particles in the base fluid. The dispersion of solid nanoparticles in conventional fluids changes their transport properties remarkably. Molecular dynamics simulation (MDS) is an important approach to study the transport properties of nanofluids. However, the computation amount is huge, and it is very difficult to use the normal MDS to capture the transient flow and heat processes in Cu-H₂O nanofluids if the regions in the simulation reach 149.644³ nm³ or 299.288³ nm³, and the number of Cu nano-particles reaches 6–64. Further study by means of simulation on the effects on effective transport properties of nanofluids is also difficult. In this paper, the water-based fluid region of 149.644³ nm³ or 299.288³ nm³ is assumed as continuum phase because of the very low Knudsen number of fluid, and the effects of water on nano-particles are fitted into the Cu-Cu potential parameters. Using the proposed method, the computation amount is significantly reduced. The effective thermal conductivity and dynamic viscosity coefficient of Cu-H₂O nanofluids under the stationary condition are simulated and the results are verified with existing experimental data. The motion and aggregation processes of nano-particles in the water-based fluids at different velocity shear rate are simulated. Effects of velocity shear rate, fluid velocity, temperature gradient, and average temperature on the effective thermal conductivity and the dynamic viscosity of Cu-H₂O nanofluids in the processes of flow and heat transfer are studied. Three conclusions can be drawn from the obtained results. Firstly, the proposed method is feasible to capture the transient flow and heat processes in Cu-H₂O nanofluids, and is also capable to further study the transport properties of Cu-H₂O nanofluids. Secondly, the velocity shear rate acting on a nanofluid can effectively prevent the aggregating process of nano-particles, and therefore reduce the diameter of particle-aggregations. Finally, the velocity shear rate and the average temperature of Cu-H₂O nanofluids have much more effects on the transport properties, while the fluid velocity and temperature gradient have less effects; the velocity shear rate increases the effective thermal conductivity of a nanofluid but decreases its dynamic viscosity. A rise of average temperature increases the effective thermal conductivity but decreases the dynamic viscosity.

Keywords: nanofluids, molecular dynamics simulation, transport properties, aggregation

PACS: 66.20.Cy, 65.80.-g, 47.11.Mn

DOI: 10.7498/aps.64.196601

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central Universities, China (Grant No. FRF-SD-12-007B).

† Corresponding author. E-mail: liuxj@ustb.me.edu.cn