

8-3-2020

## Molecular Dynamics of Fluid Properties by Normal Oscillations of Solid Wall

Haijun Dong

*School of Mechanical Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China;*

Xiaoqing Lu

*School of Mechanical Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China;*

Haopeng Zhang

*School of Mechanical Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China;*

Mingming Shan

*School of Mechanical Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China;*

Follow this and additional works at: <https://dc-china-simulation.researchcommons.org/journal>



Part of the Artificial Intelligence and Robotics Commons, Computer Engineering Commons, Numerical Analysis and Scientific Computing Commons, Operations Research, Systems Engineering and Industrial Engineering Commons, and the Systems Science Commons

---

This Paper is brought to you for free and open access by Journal of System Simulation. It has been accepted for inclusion in Journal of System Simulation by an authorized editor of Journal of System Simulation.

---

## Molecular Dynamics of Fluid Properties by Normal Oscillations of Solid Wall

### Abstract

**Abstract:** The fluid properties under the condition of the solid wall normal oscillations were studied using the molecular dynamics method. The two dimensional Couette flow model made up of copper wall and argon fluid was built. The fluid state of the near wall was simulated under the different oscillation parameters of solid wall and the corresponding fluid velocity field, the density distribution, the potential energy curves and the friction force were obtained. Then the influence mechanism of the wall oscillations on the frictional drag at liquid-solid interface was investigated. *The results indicate that the frictional drag between wall and fluid can be reduced effectively by applying normal oscillations for the solid wall and the drag reduction rate is mainly dependent on the oscillation parameters. Meanwhile, the decrease of fluid density near wall leads to the reduction in frictional drag at liquid-solid interface.*

### Keywords

wall oscillations, drag reduction, flow field, molecular dynamics simulation

### Recommended Citation

Dong Haijun, Lu Xiaoqing, Zhang Haopeng, Shan Mingming. Molecular Dynamics of Fluid Properties by Normal Oscillations of Solid Wall[J]. Journal of System Simulation, 2015, 27(8): 1680-1686.

## 壁面法向振动流体特性的分子动力学

董海军, 卢晓青, 张浩鹏, 单明明

(西北工业大学机电学院, 西安 710072)

**摘要:** 应用分子动力学方法研究了壁面法向振动条件下流体的流动特性。构建了由铜固体壁面与氩流体构成的二维 Couette 流动几何模型。通过对固体平板壁面施加不同振动参数的法向振动, 模拟仿真了不同振动参数下近壁面流体的流动状态, 获得了相应的流体流动参数, 进而研究分析了壁面振动对固液界面间摩擦阻力的影响机制。研究表明, 对壁面施加法向振动可以有效地减小固液界面间的摩擦力, 减阻的幅度与振动参数关系很大; 通过对流体的速度场及密度分布的分析, 认为固体壁面法向振动使近壁面流体密度大幅度降低是导致固液界面间摩擦力减小的主要原因。

**关键词:** 壁面振动; 减阻; 流场; 分子动力学模拟

中图分类号: O353.1

文献标识码: A

文章编号: 1004-731X (2015) 08-1680-07

## Molecular Dynamics of Fluid Properties by Normal Oscillations of Solid Wall

Dong Haijun, Lu Xiaoqing, Zhang Haopeng, Shan Mingming

(School of Mechanical Engineering, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, China)

**Abstract:** The fluid properties under the condition of the solid wall normal oscillations were studied using the molecular dynamics method. The two dimensional Couette flow model made up of copper wall and argon fluid was built. The fluid state of the near wall was simulated under the different oscillation parameters of solid wall and the corresponding fluid velocity field, the density distribution, the potential energy curves and the friction force were obtained. Then the influence mechanism of the wall oscillations on the frictional drag at liquid-solid interface was investigated. *The results indicate that the frictional drag between wall and fluid can be reduced effectively by applying normal oscillations for the solid wall and the drag reduction rate is mainly dependent on the oscillation parameters. Meanwhile, the decrease of fluid density near wall leads to the reduction in frictional drag at liquid-solid interface.*

**Keywords:** wall oscillations; drag reduction; flow field; molecular dynamics simulation

## 引言

减小水下航行器的阻力、提高航速、节约能源消耗是人类一直追求的目标。自从 1992 年 Jung W J 等<sup>[1]</sup>通过对槽道湍流的直接数值模拟发现壁面展

向周期振动能够有效地减小壁面阻力以来, 壁面振动减阻越来越受到人们关注。1994 年 Laadhari F 等<sup>[2]</sup>进行实验研究了壁面展向振动时湍流边界层的流动情况, 实验结果表明, 靠近振动壁面处湍流边界层的平均速度梯度较小, 湍流强度降低, 从而验证了壁面振动可以减小湍流边界层的表面摩擦阻力。之后, 很多学者<sup>[3-8]</sup>对此问题也进行了相关的数值模拟和实验研究, 都得到了一致的阻力与湍流强度降低的结论。

目前大都研究壁面展向振动对液体流场的影



收稿日期: 2015-04-30 修回日期: 2015-06-15;  
基金项目: 国家自然科学基金(51275412);  
作者简介: 董海军(通讯作者 1960-), 男, 博士, 副教授, 研究方向为机械系统动力学, 机构学, MEMS;  
卢晓青(1990-), 女, 硕士生, 研究方向为流体力学壁面振动减阻。

<http://www.china-simulation.com>

• 1680 •

响, 而少数一些文献的研究结果以及实际中诸如“管道增输器”装置<sup>[9]</sup>的应用效果均表明壁面在其他方向上的振动也具有减阻的效果。另外, 受超声振动切削良好减阻效果的启示, 本文采用分子动力学模拟技术, 通过对壁面法向高频振动条件下近壁面流体的流场特性进行模拟仿真, 来探讨振动对近壁面流体的流场特性的影响。

## 1 模拟体系的建立与基本原理

### 1.1 模拟体系的建立

考虑到壁面法向振动情况下, 流动参数只在与展向垂直的平面内变化, 属于二维平面流场, 因而为了减小计算量, 采用二维模型。利用 LAMMPS 软件<sup>[10]</sup>, 构建二维 Couette 流动几何模型, 如图 1 所示。

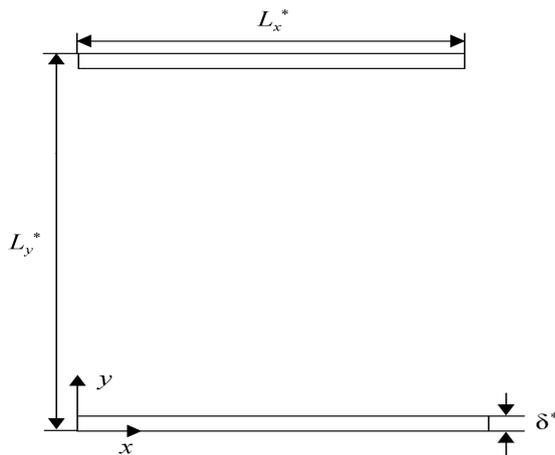


图 1 分子动力学计算模型

为了保证模拟的可靠性, 模拟系统由材料参数已知的上、下两个材料为铜的金属薄壁与其间的氩流体组成, 各金属薄壁均由 10 层铜原子采用 Sq2 晶格结构<sup>[11]</sup>组成。为了缩短弛豫时间, 氩流体的初始状态也采用相同的构型, 流体初始数目密度  $\rho^* = 0.837$ 。模型的总尺寸为  $L_x^* = 278.24$ ,  $L_y^* = 386.444$ ; 上下金属薄壁的厚度相同, 即  $\sigma^* = 6.956$ 。模型中总原子数为 90180 个, 其中氩流体原子总数为 86580 个, 每个金属薄壁中铜原子数为 1800 个。

### 1.2 相互作用势及其参数

经典分子动力学模拟中, 在不涉及具体物质的定性研究中多采用 Lennard-Jones 势能函数来描述原子间的相互作用。使用它来描述液态氩原子间的相互作用能够很好地与实验数据相吻合, 并且其形式简单、计算量小。

在本文分子动力学模拟中, 研究的重点是固体壁面振动对近壁区域氩流体的影响, 为使固体壁面整体能够按照预定的规律运动, 同时为了减小计算量, 不考虑固体壁面内铜原子间的相互作用, 限制铜原子热自由运动。氩-氩原子间、氩-铜原子间的相互作用势均采用 Lennard-Jones 势函数:

$$\varphi(r_{ij}) = \begin{cases} 4\varepsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right] & \text{若 } r \leq r_c \\ 0 & \text{若 } r > r_c \end{cases} \quad (1)$$

式中:  $\sigma$ 、 $\varepsilon$  分别表示长度、能量参数;  $r$  粒子间距;  $r_c$  截断半径。在本文的模拟中, 氩原子间 LJ 势函数截断半径取  $2.5\sigma_{\text{Ar}}$ , 铜原子与氩原子间 LJ 势函数截断半径取  $3\sigma_{\text{Ar}}$ 。

氩-铜原子间的作用势函数参数根据 Lorentz-Berthelot 原则获取:

$$\varepsilon_{\text{Ar-Cu}} = \sqrt{\varepsilon_{\text{Ar}} \cdot \varepsilon_{\text{Cu}}} \quad (2)$$

$$\sigma_{\text{Ar-Cu}} = \frac{1}{2}(\sigma_{\text{Ar}} + \sigma_{\text{Cu}}) \quad (3)$$

式中: 下标 Ar 和 Cu 分别表示液体氩和固体铜。

不同原子间的 LJ 势函数参数值如表 1 所<sup>[12]</sup>:

表 1 不同原子间 Lennard-Jones 势函数参数值

原子类型	$\sigma(\text{nm})$	$\varepsilon(\text{J})$
氩-氩	0.3405	$16.5402 \times 10^{-22}$
铜-铜	0.2338	$65.5815 \times 10^{-21}$
氩-铜	0.2872	$10.4153 \times 10^{-21}$

在模拟中选定氩原子的 LJ 势能参数  $\sigma_{\text{Ar}} = 0.34\text{nm}$ ,  $\varepsilon_{\text{Ar}} = 16.5402 \times 10^{-22}\text{J}$  分别作为长度和能量的基本单位, 氩原子的质量  $m_{\text{Ar}} = 39.95 \times 1.6747 \times 10^{-24}\text{g}$  作为质量的基本单位, 时间基本单位为  $2.161 \times 10^{-12}\text{s}$ , 计算中涉及的所有其他物理量均经由上述基本单位转换为无量纲值。

具体转换关系见下表 2。

表 2 各物理量无量纲化关系式

物理量	转换关系	物理量	转换关系
原子间距	$r^* = \frac{r}{\sigma}$	时间	$t^* = t \sqrt{\frac{\epsilon}{m\sigma^2}}$
能量	$E^* = \frac{E}{\epsilon}$	速度	$v^* = v \sqrt{\frac{m}{\epsilon}}$
作用力	$f^* = f \frac{\sigma}{\epsilon}$	温度	$T^* = T \frac{k_b}{\epsilon}$
压力	$P^* = P \frac{\sigma^3}{\epsilon}$	数目密度	$\rho^* = \rho \sigma^3$

### 1.3 边界条件与模拟系综

根据上述所建立的计算模型,确定需要采用混合边界条件,即  $x$  方向和  $z$  方向使用周期性边界条件,  $y$  方向根据实际状态采用固壁边界。

模拟体系采用 NVT 系综,使用 Nose-Hoover 方法,维持系统温度在 90 K 左右。需要注意的是,在非平衡分子动力学模拟中,粒子速度往往由平流速度(advection velocity)和热运动速度(thermal velocity)2 部分组成,而温度仅与粒子热运动速度密切相关,因此需要将此速度偏差(平流速度)从粒子速度中移除,本次模拟将采用 PUT (profile-unbiased thermostat)方法<sup>[13]</sup>实现此目的。在计算模拟体系温度时,先将模拟区域划分成若干格子,统计得出每个格子中所有原子组成的整体的质心速度,将此质心速度从处于该格子区域内的每个原子速度中移除,即可得到该格子中所有原子的热运动速度。时间步长取为  $\Delta t^* = 0.005$ 。

### 1.4 壁面振动施加方法

上金属薄壁固定不动,其中的铜原子通过 LJ 势能作用为流体区域上表面提供约束。因为下壁面法向振动情况下,振动振幅对壁面影响流场区域的大小影响很大,若所建的几何模型在  $y$  方向尺寸过小,上壁面的约束作用将对所研究的振动壁面附近的流场造成较大影响。因此,本文在研究壁面法向振动对流体流场的影响时,根据所选振幅大小的不同,几何模型在  $y$  方向上相应地选取了不同的尺寸,以尽量减小上壁面的约束作用对振动壁面附近

流场造成的影响。

为了使仿真研究更接近实际应用,本文模拟选定下壁面沿  $x$  正向的移动速度大约为一般鱼雷的行进速度,其无量纲值约为  $V_x^* = 0.2$ 。故下壁面一方面以恒定的速度  $V_x^* = 0.2$  沿  $x$  轴正向运动,同时在法向( $y$  方向)叠加周期振动;而上壁面保持静止状态。因此,上、下金属薄壁的运动方程分别为:

$$\text{对上金属薄壁有: } S_x^* = 0, S_y^* = 0 \quad (4)$$

$$\text{对下金属薄壁有: } \begin{cases} S_x^* = 0.2t^* \\ S_y^* = |A^* \sin(2\pi t^* / T^*)| \end{cases} \quad (5)$$

式中:  $S_x^*$ ,  $S_y^*$  分别表示壁面沿  $x$  方向和  $y$  方向的位移,  $A^*$  和  $T^*$  分别代表壁面法向振动的振幅和周期。

## 2 模拟结果与讨论

为探讨壁面法向振动对固-液界面摩擦阻力的影响机制,有必要分析运动壁面法向周期振动对其附近流场微观流动特性的影响。我们研究以下内容。

### 2.1 振动参数对流体法向上的质心位置的影响

下金属薄壁以式(5)中的运动方程作法向周期振动时,统计得到周期  $T^* = 200$  时,不同振幅 ( $A^* = 2, 8, 15, 30$ )下流体  $y$  方向上的质心位置随时间的变化规律,如图 2 所示。

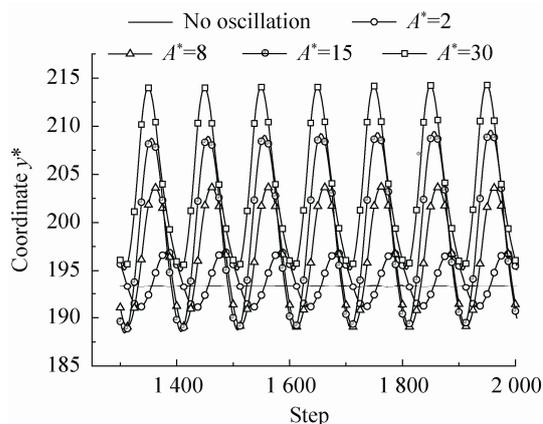


图 2 不同振幅对流体  $y$  方向质心位置的影响

可以看出,壁面仅作平动(未振动)时,流体质心位置基本不变,而给运动壁面叠加法向周期振动

后, 壁面振动引起流体在法向上做周期性振动, 流体质心位置变化曲线是近似的正(余)弦曲线, 曲线的幅值与壁面振动幅度成正比。观察曲线的平衡位置, 发现壁面法向振动时整个流场的质心上移, 且振幅越大, 移动的距离也越大。

图 3 所示为壁面在相同周期  $T^*=200$ , 不同振幅下 ( $A^*=2, 8, 15, 30$ ) 作法向振动相对于未振动时流体  $y$  方向质心相对位置变化规律, 以及该振动参数下壁面的运动规律。从图中可以看出, 流体沿  $y$  方向的运动规律与壁面法向振动并不同步, 两者之间存在相位差。

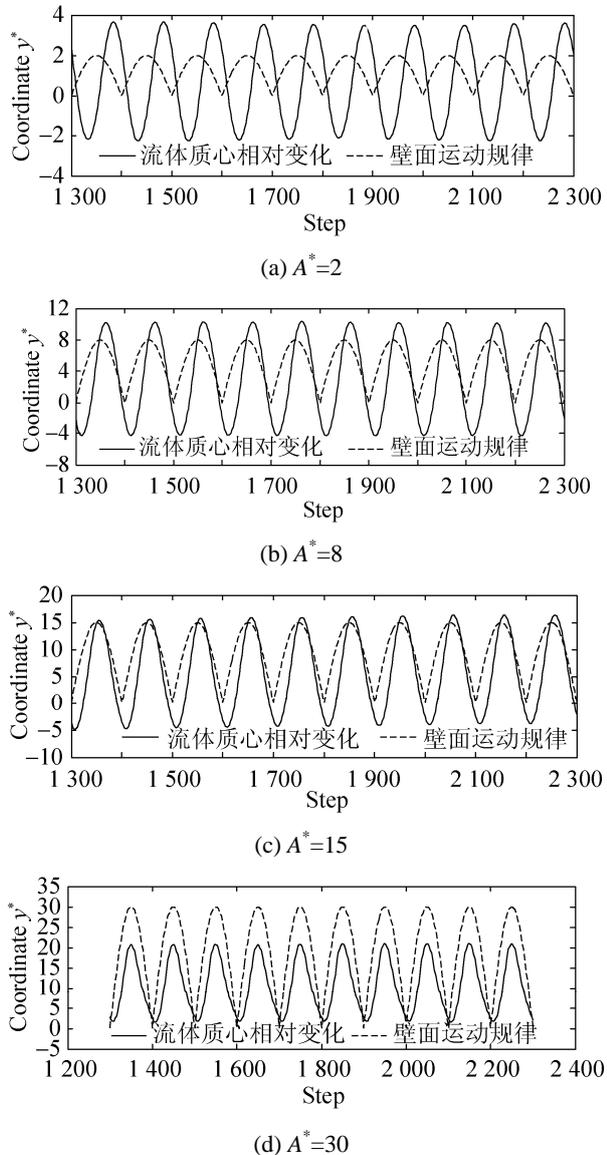


图 3 不同振幅下壁面振动与流体沿法向的运动规律

## 2.2 振动参数对流场密度分布的影响

为进一步说明壁面法向振动对流场分布的影响, 以模拟开始时刻的坐标为基准, 将流体区域沿  $y$  方向平均分为 254 层, 待系统达到稳定状态后, 统计得到流场不同位置处流体原子数目密度的变化规律。任选振动周期  $T^*=200$ , 振幅  $A^*=15$  时进行分析, 得到不同位置 ( $Y^*$  值) 处, 流体原子数目密度随步数(时间)的变化规律, 如图 4 所示。

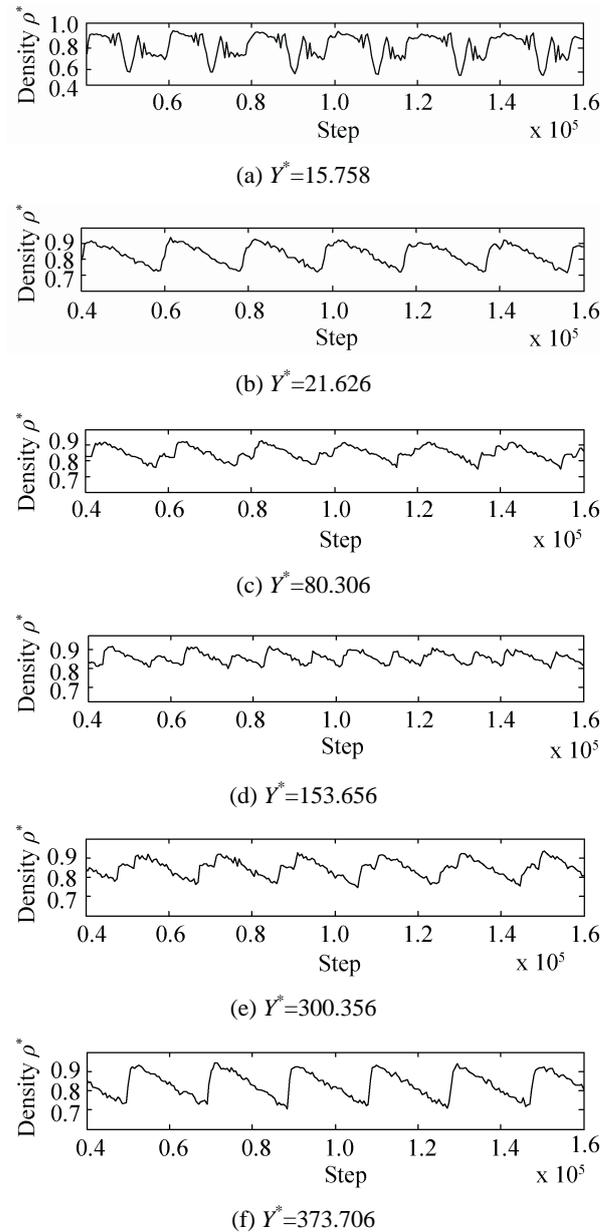


图 4 流场不同位置处原子数目密度随时间变化规律

从图 4 中可以看出, 壁面法向振动将驱使运动

壁面附近流体沿  $y$  方向运动, 不同位置处流体数目密度各自呈现周期性规律变化。对于  $Y^* > 15$  的流体, 存在某一区域, 该区域受其上部 and 下部流体的共同作用, 使得该区域中流体数目密度变化周期为其上部或下部区域变化周期的一半, 如图 4(d) 所示。而关于该区域对称的上部和下部流体的数目密度变化周期大致相同, 如图 4(c) 和 4(e) 中曲线变化周期同为 20000 步 (步长  $\Delta t^* = 0.005$ , 时间即为 100)。

### 2.3 振动参数对流体速度的影响

同样地可以研究壁面法向振动对流体  $x$  方向流速分量的影响。以模拟开始时刻的坐标为基准, 将流体区域沿  $y$  方向平均分为 254 层, 统计得到每层中流体在各个时刻沿  $x$  方向的流速。不同位置 ( $Y^*$  值) 处流体  $x$  方向流速分量随时间的变化规律, 如图 5 所示。

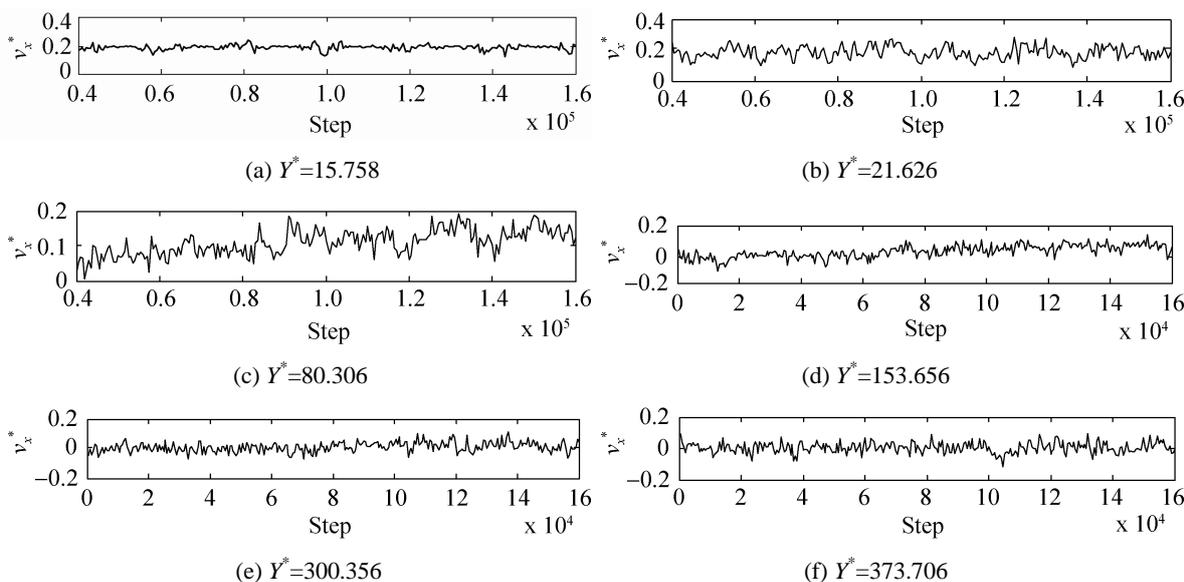


图 5 壁面法向振动对流体  $x$  方向流速的影响

从图中可以看出, 壁面法向振动会将振幅以内的流体全部驱离, 但法向振动不会对流体沿  $x$  方向流速值产生影响, 紧靠剪切壁面的那部分流体  $x$  方向的速度最大值仍为 0.2, 与壁面运动速度相同。在距离运动壁面较远处, 壁面的运动不再会对该处流体  $x$  方向流速造成影响, 这部分流体仅具有热运动速度。

图 6 所示为对图 2 中壁面法向振动时流体  $y$  方向质心变化曲线求导得到的不同振动参数下整个流场法向平均速度随时间的变化规律。从图中可见, 壁面法向振动对流场法向平均速度影响较大, 整个流场法向上的平均速度满足近似的正(余)弦变化规律, 曲线幅值随着振幅的增大而增大, 且远超过流体热运动速度值。

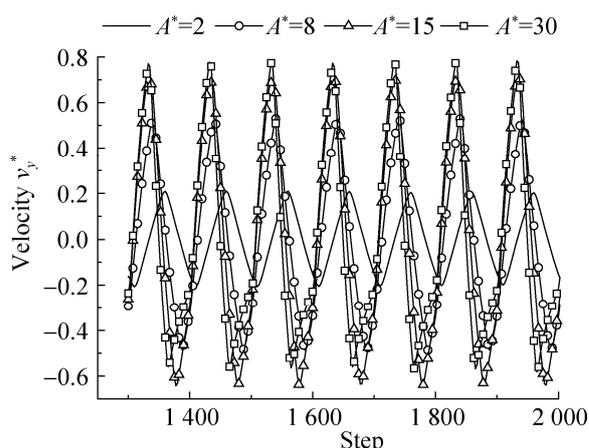


图 6 不同振动参数下整个流场法向平均速度的变化规律

## 2.4 振动参数对壁面与流体间相互作用势能的影响

由于模拟中采用 Lennard-Jones 对势来描述粒子间的相互作用, 而作用力是由势能的负梯度来表示的, 因此考察壁面法向振动参数对固体与流体间相互作用势能的影响, 对于分析壁面法向振动对固-液界面摩擦阻力的影响机制是大有裨益的。

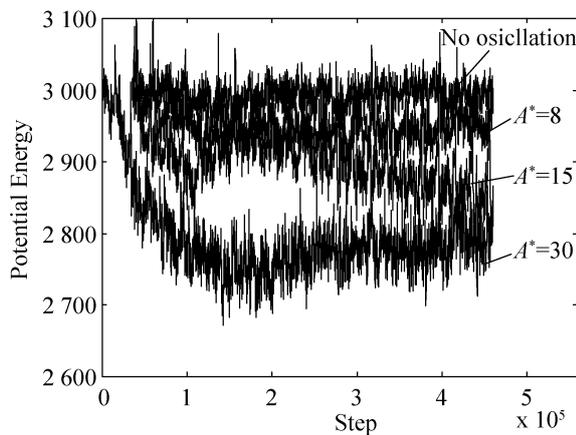


图 7 壁面法向振动对壁面与流体间相互作用势能的影响

图 7 所示为壁面在一定周期( $T^*=200$ )不同振幅( $A^*=8, 15, 30$ )下作法向振动对壁面与流体间相互作用势能的影响。从图中可以看出, 壁面振动导致壁面与流体间的相互作用势能降低, 并且振幅越大, 势能减小程度越显著。

## 2.5 振动参数对固-液界面间摩擦阻力的影响

由于本文研究的最终目标, 是要揭示壁面振动减阻的机理以及探寻减阻效果最佳的振动参数, 因而在模拟研究时, 总想先寻找出能够减阻的振动参数区域。经过多次变参数试算, 发现壁面法向振动时, 振动周期(频率)和振幅对减阻效果影响都很大。在试算的多组参数中, 振动周期(频率)对减阻效果的影响似乎是单方向的, 即对于给定的振幅, 振动周期必须足够小(即振动频率必须足够高), 壁面法向振动才具有减阻效果, 否则壁面法向振动不但不能减小摩擦阻力, 反而会加大固-液界面间的摩擦阻力。由于分子动力学模拟的计算量非常大,

加之我们的模拟体系又很大, 这就使得计算非常费时。因此, 作为初次尝试性的研究, 本文只在试算的几组参数中选取能够减阻的一个周期(频率)作为固定值, 来研究这一振动周期下不同振幅对固-液界面间摩擦阻力的影响。

本文研究了相同振动周期  $T^*=200$ , 不同振幅下( $A^*=2, 8, 15, 30$ )振动壁面所受摩擦力  $F_x^*$  随步数(时间)的变化规律。模拟结果显示给运动壁面施加法向振动后, 壁面所受摩擦力振荡现象加剧, 但在某些振幅下也会呈现一定周期性变化规律。为进一步直观地说明壁面法向振动对固-液界面间摩擦阻力的影响, 在系统达到稳定状态后, 统计得到相同法向振动周期, 不同振幅下剪切壁面所受平均摩擦力值, 如表 3 中所示。

表 3 运动壁面沿法向振动时不同幅值对摩擦力的影响

壁面运动情况	壁面所受摩擦力 $F_x^*$	减阻幅度
未施加振动时	-2.1023	
$A^*=2$	-2.1492	-2.23%
$A^*=8$	-1.5356	26.96%
$A^*=15$	-1.0424	50.42%
$A^*=30$	-0.7383	64.88%

由表 3 中可以看出, 运动壁面在一定周期下作法向振动, 当振动幅值超过一定值(这里  $A^*>2$ )时, 能够有效地降低运动壁面所受的摩擦阻力。在所选定的振动周期(频率)下, 减阻幅度随振幅增大总体呈增大趋势, 壁面法向振动最大能降低约 65% 的摩擦阻力。

## 2.6 壁面法向振动对固-液界面间摩擦阻力影响机制

(1) 从流场的密度分布来看, 壁面沿法向作周期振动时, 由于壁面内铜原子对液体氩原子的作用力, 壁面推动其附近流体沿法向运动, 而这部分近壁流体同时又受到上部流体的作用力, 迫使其向下运动, 流体沿法向的运动规律与壁面振动不同步(图 3); 当壁面振动的周期足够短(振动频率足够高), 以至于壁面到达下一个新的运动周期时, 壁

面附近流体仍未“返回”到原位置, 那么在某段时间内, 壁面附近流体数目密度值降低(图 4), 甚至有可能不存在流体原子, 处于完全真空状态, 如此一来, 固体壁面与流体界面间摩擦阻力得到大幅度降低。

(2) 从振动时壁面与流体间相互作用势能的变化(图 7)来看, 壁面法向振动导致壁面与流体间的相互作用势能降低, 进而相互作用力减小。因此, 这也是壁面振动减小摩擦阻力的原因之一。

### 3 结论

利用 LAMMPS 软件, 构建了由铜固体壁面与氩流体构成的二维 Couette 流动几何模型。通过对固体平板壁面施加不同振动参数的法向振动, 模拟仿真了不同振动参数下近壁面流体的流动状态, 获得了相应的流体速度场、密度分布、壁面与流体间相互作用势能以及固液界面间的摩擦力。研究结果表明:

(1) 壁面振动使得近壁面流体密度减小, 从而使流体粘度降低, 固液界面间的摩擦阻力随之降低。

(2) 固液界面间的摩擦阻力与模拟体系的总势能直接相关, 壁面振动使得总势能大幅度降低, 从而使得摩擦阻力也相应的降低。

### 参考文献:

- [1] Jung W J, Mangiavacchi N, Akhavan R. Suppression of turbulence in wall - bounded flows by high - frequency spanwise oscillations[J]. *Physics of Fluids A: Fluid Dynamics* (1989-1993), 1992, 4(8): 1605-1607.
- [2] Laadhari F, Skandaji L, Morel R. Turbulence reduction in

a boundary layer by a local spanwise oscillating surface[J]. *Physics of Fluids* (1994-present), 1994, 6(10): 3218-3220.

- [3] Baron A, Quadrio M. Turbulent drag reduction by spanwise wall oscillations[J]. *Applied Scientific Research*, 1995, 55(4): 311-326.
- [4] Choi K S, DeBisschop J R, Clayton B R. Turbulent boundary-layer control by means of spanwise-wall oscillation[J]. *AIAA journal* (S0001-1452), 1998, 36(7): 1157-1163.
- [5] 黄乐萍, 范宝春, 董刚. 展向振动流向传播的波动壁面的湍流减阻[J]. *力学学报*. 2011, 43(2): 277-283.
- [6] 郭春风, 范宝春. 槽道湍流的法向与展向电磁力壁面减阻[J]. *推进技术*. 2013, 34(8): 1023-1029.
- [7] 黄乐萍, 范宝春, 董刚. 槽道湍流壁面展向周期振动减阻机理研究. *南京理工大学学报(自然科学版)*, 2010, 34(3): 361-366.
- [8] 黄伟希, 许春晓, 崔桂香, 等. 壁面展向周期振动的槽道湍流减阻机理的研究[J]. *力学学报*, 2004, 36(1): 24-30.
- [9] 廖振方, 陈德淑, 潘志敏, 等. 管道增输器的工作原理与工业应用试验[J]. *油气储运*, 2010, 29(1): 52-53.
- [10] S. J. Plimpton, Fast Parallel Algorithms for Short-Range Molecular Dynamics[J]. *J Comp Phys* (S0021-9991), 1995, 117: 1-19 .
- [11] 程开甲. 固体物理学[M]. 北京: 高等教育出版社, 1960.
- [12] Jizu Lv, Minli Bai, Wenzheng Cui, Xiaojie Li. The molecular dynamic simulation on impact and friction characters of nanofluids with many nanoparticles system[C]// Lv et al. *Nanoscale Research Letters* 2011, 6: 200.
- [13] Evans D J, Morriss G P. Shear Thickening and Turbulence in Simple Fluids[J]. *Phys. Rev. Lett* (S1079-7114), 1986, 56(20): 2172-2175.