

DOI :10.3876/j.issn.1000-1980.2011.03.014

磁流变液微观结构的数值模拟

李杰如¹ 杜成斌²

(1.河海大学文天学院,安徽 马鞍山 243031;2.河海大学力学与材料学院,江苏 南京 210098)

摘要:通过分析磁流变液中固体颗粒的受力,利用分子动力学中的速度 Verlet 算法,对磁流变液链化过程和剪切过程进行了二维数值模拟,并对影响链化和剪切的主要因素进行了研究.研究结果表明:粒子的运动最终会在模拟区域内形成若干条几乎平行的链;颗粒链化时的变化过程先快后慢;整个链化过程所耗费的时间在 2~3 ms 之间;颗粒体积百分率越大,模拟时所成通链越多;磁流变液受到剪切荷载作用时,低剪切速率下,旧链的断裂和新链的生成基本上达到动态平衡的状态,高剪切速率下,粒子向剪切方向的倾斜程度变大,但是通链减少,新链的生成速度明显跟不上旧链的断裂速度,单链的剪切强度先增大后减小,磁流变液的剪切屈服应力随磁感应强度和颗粒体积百分率的增大而增大.

关键词:磁流变液;微观结构;链化;剪切;屈服应力;数值模拟

中图分类号: TB381 **文献标志码:** A **文章编号:** 1000-1980(2011)03-0311-06

磁流变液是一种非常具有发展前途和工程应用价值的新兴智能材料,被认为是最具前途的智能材料之一^[1].磁流变液是由非胶体的细小颗粒分散溶于绝缘基液中形成的悬浮液,在外磁场作用下能产生明显的磁流变效应,其力学、热学、流变学性能等会迅速发生变化,响应时间很短,为毫秒量级,且这种液态和固态之间快速转化是可逆的.在该转化过程中,磁流变液的黏度保持连续、无级变化,固化强弱可由外加磁场控制,能耗极小,可实现实时的主动控制^[2-5].

1948 年 Rabinow^[6]最早发明了磁流变液及其应用装置离合器. Ginder 等^[7]认为在外磁场作用下,磁流变液中的铁磁性固体颗粒形成的是一条一条的单链,并从磁性固体颗粒的非线性磁化、磁饱和以及相邻颗粒接触位置处的局部磁场等方面进行了有限元计算,得出了磁流变液的剪切屈服应力的极值与磁性固体颗粒的饱和磁化强度成正比的结论,该结论也被后来的实验所证实. Rosensweig^[8]设计出一种平均场模型——层模型,由于该模型忽略了相邻颗粒间的磁场集中效应,其结果与实验值相比往往偏低. Bossis 等^[9-10]将 Klingenberg 等^[11]利用电流变液推导出的恢复力公式应用于磁流变液,但由于没有考虑磁性粒子的非线性磁化过程,其结果往往偏大.

近年来,国内武汉理工大学的阮中尉^[12]建立了 BCT 结构(体心四方结构)模型和物理材料模型,得到了磁流变液受小角度剪切变形情况下其剪切应力的理论计算公式;中国矿业大学的赵四海等^[13]研究了磁流变液中颗粒的相互作用,分析了磁流变液产生链状结构的原因,推导出磁流变液在外磁场作用下的屈服应力公式;广东工业大学陈伟俊^[14]在对各种磁流变液的力学模型对比分析的基础上,根据磁场的库仑定律,提出了一种能够简洁表示各种因素对磁流变液力学性能影响的力学模型.

基于微结构的建模及力学分析只能描述磁流变液的宏观特性,不能描述微结构的形成机制及其演化过程.影响磁流变液性能的因素很多,单纯从实验或宏观角度很难系统分析各因素的影响及效果,而基于微观角度的数值模拟方法可以有效弥补这些缺陷,有利于优化磁流变材料的性能,设计高性能磁流变液.本文从数值模拟角度出发,利用分子动力学中的速度 Verlet 算法,基于磁流变液中磁性颗粒的实际受力,建立磁流变液链化和剪切的分析模型,采用 Matlab 语言编程,分析粒子的运动规律,探讨磁流变液微观结构的链化形成过程和剪切变形过程.

收稿日期:2010-06-23

基金项目:江苏省高技术研究计划重大项目(BG2007048)江苏省第五批六大人才高峰项目(B08041)

作者简介:李杰如(1984—),女,江苏泗阳人,硕士,主要从事工程(智能)材料的力学行为与特性研究. E-mail: lijieru@yahoo.cn

1 磁性颗粒的力学模型

在外加磁场的作用下,颗粒被磁化成偶极子在基液中产生运动,粒子在运动过程中起重要作用的力是颗粒之间的磁力、排斥力和基液对颗粒的黏性阻力,其他力由于影响很小,可以忽略不计。

1.1 磁性颗粒受力分析

1.1.1 颗粒之间的磁力

假设磁流变液中的基液是不可磁化的,其中的铁磁性固体颗粒为大小相同的圆球状,粒子的半径均为 R , 体积为 V , 在外加磁场 H 作用下,把固体颗粒看成是一个个磁偶极子,其方向与外加磁场方向相同。则颗粒被磁化后的磁矩^[15]为

$$m = VM = \frac{4}{3}\pi R^3 \chi H \quad (1)$$

式中: M ——磁化强度, $M = \chi H$; χ ——颗粒的磁化率。

颗粒 i 受到的磁力表达式^[16]为

$$F_m = \sum_{j \neq i} \left[\frac{3\mu_0}{4\pi r_{ij}^5} (m_i \cdot m_j - 5m_{ir}m_{jr}) r_{ij} + \frac{3\mu_0}{4\pi r_{ij}^4} (m_{ir}m_j + m_{jr}m_i) \right] \quad (2)$$

式中: μ_0 ——真空磁导率; r_{ij} ——两颗粒 i 和 j 之间的相对位置矢量(指向 i), $r_{ij} = \|r_{ij}\|$; m_{ir} , m_{jr} ——磁矩 m_i 和 m_j 沿相对位置矢量 r_{ij} 方向的分量大小。

假设磁场方向为竖直向上,两颗粒 i 和 j 之间的中心连线与磁场的夹角为 θ_{ij} , 利用式(1)、式(2)所示的磁力表达式可改写为

$$F_m = \sum_{j \neq i} \frac{4\pi\mu_0\chi^2 H^2 R^6}{3r_{ij}^4} [(1 - 5\cos^2\theta_{ij})\hat{r}_{ij} + 2\cos\theta_{ij}\hat{y}] \quad (3)$$

式中: $\hat{r}_{ij}$ ——两颗粒相对位置 r_{ij} 的单位矢量; $\hat{y}$ —— y 向的单位矢量。

1.1.2 颗粒之间的排斥力

颗粒在运动过程中由于发生碰撞而相互排斥,排斥力^[17]为

$$F_r = \sum_{j \neq i} F_0 \exp\left[-\beta\left(\frac{r_{ij}}{2R} - 1\right)\right] \hat{r}_{ij} \quad (4)$$

式中 β 为材料参数。

由式(3)可以看出,当粒子沿磁场方向排列且接触时,颗粒之间的磁力最大。 F_0 可以取为两个颗粒相接触时的最大磁力,此时粒子沿磁场方向排列且接触, $r_{ij} = 2R$, $F_m = -F_r$, F_0 的取值为

$$F_0 = \frac{3\mu_0 m^2}{32\pi R^4} \quad (5)$$

1.1.3 基液对颗粒的黏性阻力

假设颗粒为半径为 R 的圆球形,基液为黏性不可压流体,速度不太大时颗粒在静止液体中平动时受到的阻力 F_v 由 Stokes 阻力公式^[18]来表示:

$$F_v = -6\pi R\eta \frac{dr}{dt} = -6\pi R\eta v \quad (6)$$

式中: η ——液体的黏性系数; r ——颗粒的位置矢量; v ——颗粒运动的速度矢量。

1.2 颗粒运动的动力学方程

设单个颗粒质量为 m , 则

$$m = \rho V = \frac{4}{3}\pi R^3 \rho \quad (7)$$

式中 ρ 为铁磁性固体颗粒材料的密度。

由牛顿第二定律,颗粒运动的动力学方程为

$$ma = m \frac{d^2 r}{dt^2} = F_m + F_r + F_v \quad (8)$$

1.3 颗粒运动的模拟迭代算法

无外加磁场时颗粒在基液中随机分布,受到磁场作用后,颗粒即被磁化成一个个的磁偶极子,受到其他颗粒对它的磁力和排斥力等力的作用,从而具有了加速度,这样速度的增量和位移的增量就可以求出,而颗粒的位置在位移增量的影响下就发生了改变,从而颗粒受力也发生了改变,引起加速度和速度的改变,依次求出每个时间步长内的加速度、速度和位移,直到系统达到稳定即平衡状态为止。

分子动力学中,常见的求解运动方程的算法有 Verlet 算法、Leapfrog(蛙跳)算法、Gera(预测-校正)算法和 Velocity Verlet 算法(速度 Verlet 算法)等。速度 Verlet 算法可以同时给出位置、速度和加速度,并且不损失精度,所以本文的模拟过程选择速度 Verlet 算法。该算法需储存每个时间步颗粒的坐标、速度和力,每步计算涉及 2 个时间步,需要计算颗粒的位置更新以后和速度更新之前的力^[19]。

由于无外加磁场时,颗粒是随机分布在基液中且几乎静止不动,所以颗粒的初始位置由随机函数产生,初始速度为零,则 t 时刻的颗粒运动的加速度为

$$a(t) = \frac{F_m(t) + F_r(t) + F_v(t)}{m}$$

(9)

设模拟时所用的时间步长为 Δt , 则 $t + \Delta t$ 时刻的颗粒位置为

$$u(t + \Delta t) = u(t) + v(t)\Delta t + \frac{1}{2}a(t)\Delta t^2$$

(10)

$t + \Delta t$ 时刻的颗粒速度为

$$v(t + \Delta t) = v(t) + \frac{1}{2}[a(t) + a(t + \Delta t)]\Delta t$$

(11)

颗粒的位置、速度和受力不断更新,式(9)(10)和(11)不断循环,直至颗粒的位置达到稳定状态(稳定判据为系统动能小于设定值),即认为循环终止。模拟区域采用周期性边界条件。

2 模拟结果分析

2.1 链化过程的模拟

模拟中颗粒磁化率 $\chi = 1$,真空磁导率 $\mu_0 = 4\pi \times 10^{-7} \text{ H/m}$,材料参数 $\beta = 9$,固体颗粒材料的密度 $\rho = 7.5 \text{ t/m}^3$,基液的黏性系数 $\eta = 0.001 \text{ Pa}\cdot\text{s}$,外加磁场强度 $H = 10.7 \text{ kA/m}$ 。为了得到最好的链化效果,取颗粒体积百分率 $\xi = 30\%$,颗粒半径 $R = 5 \mu\text{m}$,步长 $20 \mu\text{s}$ 。链化过程模拟结果见图 1。颗粒链化过程先快后慢,整个链化过程所耗费的时间在 $2 \sim 3 \text{ ms}$ 之间。

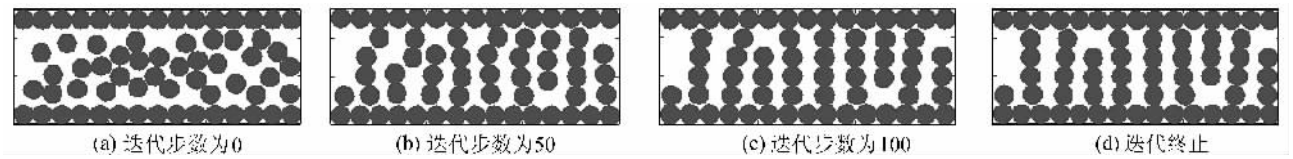


图 1 颗粒链化过程

Fig. 1 Illustration of chain process for particles

颗粒的体积百分率对磁流变液的性能有很大的影响,一般要在 $15\% \sim 30\%$ 范围内。下面以 $R = 5 \mu\text{m}$ 为例,适当扩大模拟范围来比较不同颗粒体积百分率时颗粒成链的区别。图 2 为颗粒体积百分率 $\xi = 15\%$, 20% , 25% 和 30% 时的模拟结果。

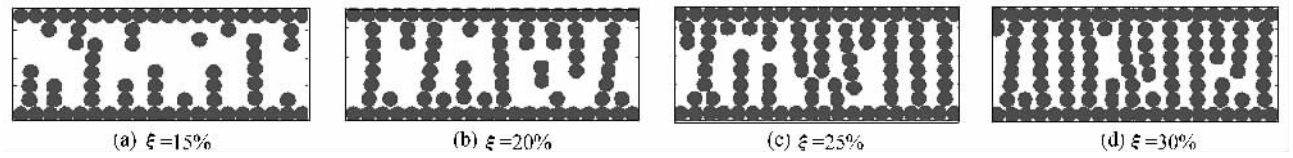


图 2 不同颗粒体积百分率的模拟结果

Fig. 2 Simulated results of different volume percentages for particles

从图 2 可以看出,颗粒体积百分率较小时,所形成的通链较少,甚至几乎没有,达到稳定状态时,大多数粒子还是以支链、孤链或单个粒子的形态存在。随着颗粒体积百分率的增加,通链逐渐增多,支链、孤链和单

个的粒子在减少,颗粒体积百分率越大,所成通链越多,所以,在条件容许的范围内,在充分考虑粒子沉降性的基础上,应尽可能地增大颗粒的体积百分率。

2.2 剪切过程的模拟

磁流变液在受到外界的作用发生剪切流动时,基液也会同时流动,设其沿 x 正方向流动,剪切速率为 $\dot{\gamma}$,则颗粒所受黏性阻力公式(6)应改写为

$$F_v = -6\pi R\eta(\mathbf{v} - \dot{\gamma}\hat{x}) \quad (12)$$

式中 $\hat{x}$ 为剪切方向的单位矢量。

以图 2(d) 的模拟结果作为初始条件,上板在外力作用下作匀速剪切运动,剪切速率为 $\dot{\gamma} = 200 \text{ s}^{-1}$,下板固定不动,其微观结构的演变过程如图 3 所示。

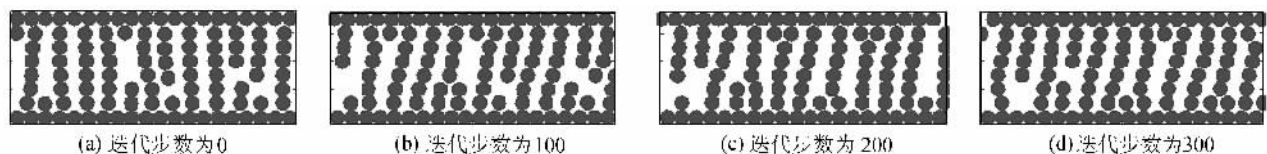


图 3 低剪切速率下的剪切过程模拟

Fig. 3 Shear process at low shear velocity

由图 3 可以看出链逐渐向剪切方向倾斜,部分链发生断裂,同时生成新链,新链由断链、支链和孤链等重组生成,但是支链、孤链和单个粒子几乎始终存在,旧链的断裂和新链的生成基本上达到动态平衡的状态,也就是说,宏观上,磁流变液的剪切应力基本上应该是稳定的。

仍然以图 2(d) 的模拟结果作为初始条件,剪切速率为 $\dot{\gamma} = 600 \text{ s}^{-1}$,其微观结构的演变过程如图 4 所示。

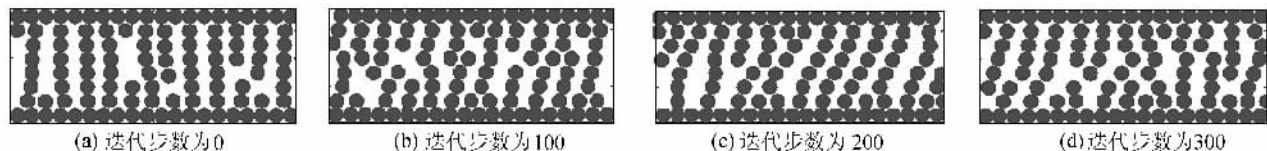


图 4 高剪切速率下的剪切过程模拟

Fig. 4 Shear process at high shear velocity

图 4 结果表明,高剪切速率下,粒子向剪切方向的倾斜程度变大,但是通链减少,新链的生成速度明显跟不上旧链的断裂速度,在宏观上应表现为高剪切速率下,随着剪切速率的增加,磁流变液的剪切应力下降。

2.3 剪切应力的计算

根据磁力的计算公式,当颗粒沿磁场方向排列时,底板所受磁力在垂直于磁场的方向,即 x 方向上分量为零,当颗粒受到外界的剪切作用而倾斜时,磁力在 x 方向上就有了分量,颗粒对底板在水平方向上的力的分量大小,宏观表现为剪切应力的大小。

设不受剪切时同一链中相距 k 个颗粒的 2 个颗粒之间的距离为 $d_k = 2kR$,则剪切过程中,链被拉长后,该距离变为 $d_k = 2kR/\cos\theta$,则单链对宏观剪切应力的贡献,即单链的剪切强度为

$$\bar{\tau}_i = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{3\mu_0^3}{4\pi d_k^4} (m^2 - 5m^2 \cos^2\theta) \sin\theta = \frac{4A\pi\mu_0\chi^2 H^2 R^6}{3(2R)^4} (1 - 5\cos^2\theta) \cos^4\theta \sin\theta \quad (13)$$

式中 n 为每条链中的粒子数, $A = \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{k^4} \approx 1.08$ 。

单位面积内的链条数为

$$N = \frac{\xi SL/V}{S(L/2R)} = \frac{3\xi}{2\pi R^2} \quad (14)$$

式中 S ——磁流变液的底面积; L ——磁流变液的高度。

单位横截面面积内各链对宏观剪切应力贡献的和为

$$\bar{\tau} = \bar{\tau}_i N \varphi \quad (15)$$

因为磁流变液中的磁链并不都是通链,所以要乘以一个折减系数 φ 。

磁流变液的宏观剪切应力为无铁磁性颗粒时基液的剪切应力 τ_0 加上铁磁性颗粒对剪切应力的贡献 $\bar{\tau}$,即

$$\tau = \bar{\tau} + \tau_0$$
$$\tau_0 = \eta \dot{\gamma}$$

(16)

其中

利用式(13)计算的单链的应力-应变曲线见图 5 ,根据式(16)计算出的磁流变液的应力-应变曲线见图 6 ;不同磁感应强度的应力-应变曲线见图 7 ;不同颗粒体积百分率剪切应力变化情况见图 8 .

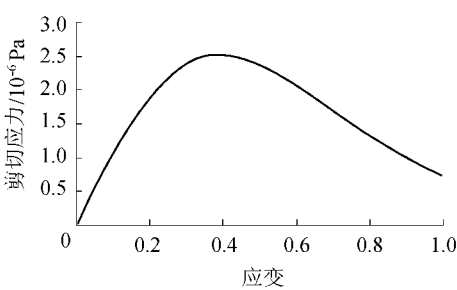


图 5 单链的应力-应变曲线

Fig. 5 Stress-strain curve of single chain

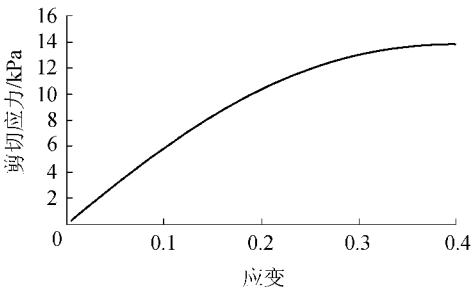


图 6 磁流变液的应力-应变曲线

Fig. 6 Stress-strain curve of MFR

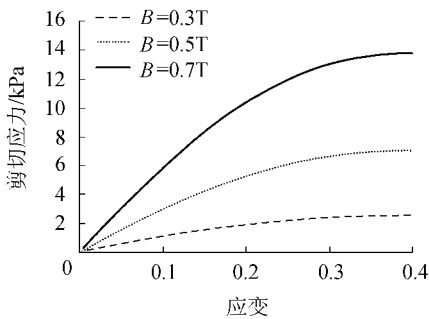


图 7 不同磁感应强度的应力-应变曲线

Fig. 7 Stress-strain curves under different magnetic induction intensities

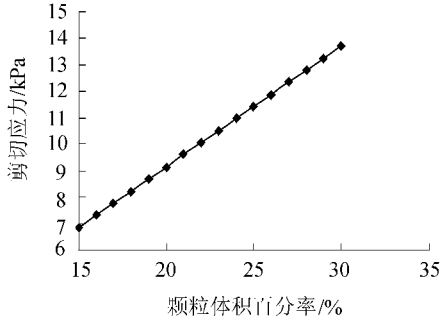


图 8 不同颗粒体积百分率的剪切应力变化

Fig. 8 Variation of shear stress under different volume percentages of particles

从图 5、图 6 可以看出 ,不同于单链的剪切强度先增大后减小 ,磁流变液的剪切强度只增大不减小 .从图 7 可以看出 ,随着磁感应强度的增大 ,磁流变液的剪切应力有着显著提高 .从图 8 可以看出 ,随着颗粒体积百分率的增大 ,磁流变液的剪切应力几乎呈线性增加 .

3 结 论

- a. 颗粒链化的变化过程先快后慢 ,在 1 ms 之内就可以形成链化 ,然后慢慢调整位置 ,最终趋于稳定 ,整个链化过程所耗费的时间在 2 ~ 3 ms 之间 .
- b. 不同颗粒体积百分率的磁流变液成链情况不同 ,颗粒体积百分率越大 ,模拟时所成通链越多 ,支链、孤链和单个粒子越少 .因此 ,在充分考虑粒子沉降性的基础上 ,在条件容许的范围内 ,应该尽可能地增大颗粒的体积百分率 .
- c. 磁流变液受到剪切时 ,链逐渐向剪切方向倾斜 ,部分链发生断裂 ,同时断链、支链、孤链和单个粒子等又重组生成新链 ,低剪切速率下 ,旧链的断裂和新链的生成基本上达到动态平衡的状态 ,但是支链、孤链和单个粒子几乎始终存在 .
- d. 高剪切速率下 ,粒子向剪切方向的倾斜程度变大 ,但是通链减少 ,新链的生成速度明显跟不上旧链的断裂速度 ,与宏观表现高剪切速率下 ,随着剪切速率的增加 ,磁流变液的剪切应力下降相吻合 .
- e. 单链的剪切强度先增大后减小 .磁流变液的剪切屈服应力随磁感应强度的增大而增大 ,随颗粒体积百分率的增大而增大 .

参考文献 :

[1] 汪建晓 ,孟光 .磁流变液研究进展[J] .航空学报 ,2002 ,23(1) :6-12.(WANG Jian-xiao ,MENG Guang. Research advances in

- magnetorheological fluid[J]. Acta Aeronautica Et Astronautica Sinica 2002 23(1):6-12.(in Chinese))
- [2] 汪建晓, 孟光. 磁流变液装置及其在机械工程中的应用[J]. 机械强度 2001 25(1):50-56.(WANG Jian-xiao, MENG Guang. Magnetorheological fluid devices and their applications in mechanical engineering[J]. Journal of Mechanical Strength 2001 25(1):50-56.(in Chinese))
- [3] 李金, 张华良. 磁流变液研究与应用[J]. 上海大学学报:自然科学版 2004 10(1):21-25.(LI Jin, ZHANG Hua-liang. Study and application of magnetorheological fluid[J]. Journal of Shanghai University: Natural Science Editions 2004 10(1):21-25.(in Chinese))
- [4] 张平. 磁流变液的研发与应用[J]. 功能材料信息 2006 3(1):19-22.(ZHANG Ping. Study and application of magnetorheological fluid[J]. Functional Materials Information 2006 3(1):19-22.(in Chinese))
- [5] 裴畅贵, 郭张霞. 磁流变液特性分析[J]. 机械管理开发 2007(2):24-25.(PEI Chang-gui, GUO Zhang-xia. Behavior analysis of magneto-rheological fluid[J]. Mechanical Management and Development 2007(2):24-25.(in Chinese))
- [6] RABINOW J. The magnrtic fluid clutch[J]. ALEE Transaction 1948 67:1308-1315.
- [7] GINDER J M, DAVID L D. Shear stress in magnetorheological fluid[J]. Role of Magnetic Saturation Appl Phys 1994, 65(26):2410-2412.
- [8] ROSENSWEIG R E. On magnetorheology and electrorheology as states of unsymmetric stress[J]. J Rheol 1995, 39(1):179-192.
- [9] BOSSIS G, LNAIRE E. Yield stresses in magnetic suspension[J]. J Rheol 1991 35(7):1345-1354.
- [10] LEMAIRE E, BOSSIS G. Yield stress and wall effects in magnetic colloidal suspension[J]. J Phys D:Appl Phys 1991(24):1473-1477.
- [11] KLINGENBERG D J, ZUKOSKI C F. Studies on the steady-shear behavior of electrorheological suspensions[J]. Langmuir 1990(6):15-24.
- [12] 阮中尉. 基于 BCT 模型的磁流变液剪切应力预测理论研究[D]. 武汉: 武汉理工大学 2006.
- [13] 赵四海, 方佳雨. 一种磁流变流体链化模型的研究[J]. 润滑与密封 2006(11):108-110.(ZHAO Si-hai, FANG Jia-yu. Theoretics study on the model of magnetic flocculation of magneto-rheological fluid[J]. Lubrication Engineering 2006(11):108-110.(in Chinese))
- [14] 陈伟俊. 适用于直线电机阻尼控制的磁流变液的技术研究[D]. 广州: 广东工业大学 2007.
- [15] FUST E, GAST A. Micrmechanics of magnetorheological suspension[J]. Physical Review E 2000 61(6):6732-6739.
- [16] 方生, 张培强. 旋转磁场作用下磁流变液颗粒运动及结构演化的模拟[J]. 化学物理学报 2001, 14(5):562-566.(FANG Sheng, ZHANG Pei-qiang. Simulation of the structure and the dynamics of the particles of mr fluids in rotating magnetic field[J]. Chinese Journal of Chemical Physics 2001, 14(5):562-566.(in Chinese))
- [17] SONIA M, CALDERON S. Rotational dynamics in dipolar colloidal suspensions: video microscopy experiments and simulations results[J]. Non-Newtonian Fluid Mech 2002 102:135-148.
- [18] 刘望一. 流体力学: [M]. 北京: 北京大学出版社 2000 46-90.
- [19] 张跃, 谷景华. 计算材料学基础[M]. 北京: 北京航空航天大学出版社 2007 50-89.

Numerical simulation for microstructure of magnetorheological fluid

LI Jie-ru¹, DU Cheng-bin²

(1. Wentian College, Hohai University, Ma'anshan 243031, China;

2. College of Mechanics and Materials, Hohai University, Nanjing 210098, China)

Abstract: 2-D numerical simulation for chain and shear processes of magnetorheological fluid (MFR) was carried out based on the analysis of forces acting on solid particles in the MFR by use of the velocity Verlet algorithm. The main factors for chain process and shear mechanical behavior were studied. The results indicate that some almost parallel chains in the simulation district are generated at the end of the simulation. The variety process of the particle chain is first quick and then slow. The whole time for the process is about 2-3 milliseconds. The larger the volume percentage of the particles, the more the number of whole chain. When the MFR is sheared under the low velocity, the split of old chains and the form of new chains are almost in a state of dynamic balance. On the contrary, the particles incline to the shear direction, but the number of the whole chains decreases, and the speed of the form of new chains is lower than that of the split of old chains obviously. The shear strength of the single chain first increases and then decreases. The yield shear stress of the MRF increases with the increase of the intensity of magneto field and the volume percentage of particles.

Key words: magnetorheological fluid; microstructure; chain; shear; yield stress; numerical simulation