

DOI: 10.7511/jslx201605003

基于格子 Boltzmann 方法的电流 变液动力学建模及数值模拟

朱石沙*, 罗奇, 刘金刚, 唐涛

(湘潭大学 机械工程学院, 湘潭 411105)

摘要: 电流变悬浮液内部结构对外电场的快速响应发生在指定的控制空间中, 在这一特指的时间和空间尺度上电流变悬浮液的物理行为特征主要为剪切速率低和流动阻尼大, 即 Mach 和 Reynolds 数一般不大, 可以视为微尺度流动来加以研究。针对这一流动特征, 基于介观理论的格子 Boltzmann 方法, 建立了电流变悬浮液两相流动的离散颗粒运动模型, 通过该模型进行了动力学模拟, 结果表明, 该模型解决了分子动力学模型难以描述的因颗粒运动造成局部流场流变特性改变的难题, 以及该流场双向耦合过程中对颗粒运动的影响。

关键词: 电流变效应; 电流变悬浮液; 微尺度流动; 格子 Boltzmann 方法

中图分类号: TB381; O37

文献标志码: A

文章编号: 1007-4708(2016)05-0670-06

1 引言

20 世纪 50 年代, 电(磁)流变材料作为一类物理特性可受外加电(磁)场控制的新型智能材料, 具有响应速度快、工作能耗低以及致动力变化范围大等优点, 备受机械工程及自动化领域的科学工作者们关注^[1-3]。然而, 至今仍然没有一项基于电流变材料的成熟产品进入市场。其原因主要是对电(磁)流变材料在外加电(磁)场作用下的各种力学性能表征及其内在的机理研究不够透彻, 特别是对多场(流动场和电场等)作用下的力学性能与材料微观结构的动态耦合关系的理解还不够深入^[4,5]。

研究电流变悬浮液动力学的目的是揭示电流变效应的机理, 寻求影响电流变效应的各种因素, 为研制能够满足工程应用的高性能电流变悬浮液提供依据。从力学以及结构的角, 研究材料(特别是考察电敏颗粒)在外加电场作用下的极化力和链(或立方)结构的相互耦合作用, 得到电流变悬浮液的动力学行为, 从而能进一步准确诠释产生电流变效应的机理。

由于电流变液介电颗粒的介观性及在电场作用下的复杂相变过程, 进行实验研究比较复杂且有不便观察的局限性。数值模拟作为一种计算机做

实验的研究方法, 在电流变技术领域得到广泛使用, 并成效显著。Kadaksham 等^[6]对电流变液在非均匀电场及流动场中的动力学行为进行了研究, 发现在给定的非均匀电场中, 当所加的压力梯度比临界值小时, 有利于颗粒的聚集。Tao^[7]研究了电流变液在电场作用下微观结构的演变过程, 讨论了动态剪切应力值随序化结构变化的动态变化。Cao 等^[8]通过实验和仿真分析了电流变液在剪切场下的三维结构演变和力学性能, 发现了动态剪切应力值在外电场作用下增长至某个临界值时, 表现出上下波动的特性行为。但是, 研究者在建立反映问题本质的数学模型时, 基本都是基于微观的分子动力学模型, 这与实际的电流变悬浮液的物理形体和行为有一定距离。这也是阻碍人们深入认识电流变效应机理的原因之一。

此外, 由于电流变悬浮液内部结构对外电场的快速响应发生在指定的控制空间中(极距一般为 1 mm~2 mm)中, 在这一特指的时间和空间尺度上, 电流变悬浮液的物理行为特征主要为剪切速率低和流动阻尼大, 即 Mach 和 Reynolds 数一般不大, 可以视为微尺度流动。研究者在模拟电流变液动力学特性时, 通常液固之间的作用力都是采用斯托克斯阻力公式近似代替^[9-11]。但也有研究者指出斯托克斯阻力公式只适用于低剪切速率下的模拟^[12,13]。进而, Pappas 等^[14]通过改进斯托克斯公式来求解液动力, 但仍不利于求解微分方程。

尽管研究者们已经意识到电流变悬浮液动力

收稿日期: 2015-04-23; 修改稿收到日期: 2015-10-07.

基金项目: 国家自然科学基金(51075345, 11172100, 51475402);
国家国际科技合作专项(2014DFA70170)资助项目.

作者简介: 朱石沙*(1954-), 男, 博士, 教授, 博士生导师
(E-mail: zssstx@xtu.edu.cn).

学所包含的信息,也许能够准确诠释电流变效应机理,但受到实验研究手段的局限和微尺度流动理论的欠缺而无法普及。因此,建立一种能够解决在微尺度流动特征下实现液动力精确计算的数值模拟方法,对进一步揭示电流变效应机理显得尤为重要。

格子 Boltzmann 方法是 20 世纪 80 年代中期提出的流体计算和物理建模的方法,是一种基于介观动理论的数值建模方法。该方法从研究对象的介观视角出发,基于分子动理论和统计力学,通过建立离散速度模型,得到研究对象的宏观物理表征。近年来,该方法已经发展成为一种模拟多相流、相变现象及微观相互作用明显系统的有效数值模拟方法。格子 Boltzmann 模型一般可分为两大类,一是将格子 Boltzmann 模型作为恢复或求解 Navier-Stokes 等偏微分方程的一种全新思路和方法;二是将格子 Boltzmann 模型与传统流体力学模型并列,将其视为一种全新的微介观动理学模型。目前,主要是采用第一种类型的格子 Boltzmann 模型。Ladd^[15]通过修正的反弹格式实现运动边界上的无滑移条件,根据动量交换方法计算相间作用力,成功地模拟了液固悬浮现象,为格子 Boltzmann 方法模拟这类流动做出了开创性的成果。随后,文献^[16,17]提出了一种精确处理曲面边界条件的格式——插值反弹边界条件,并且使用该方法成功模拟了圆柱绕流和粘性剪切流中颗粒的运动与粘性流中颗粒的沉降过程。此外,Han 等^[18]模拟了磁流变液在剪切场下的动力学过程,揭示了剪切速率与链结构的关系,并模拟得到了研究对象的三维结构图。从上述研究工作看出,该方法不需要经验方程和关联式以使控制方程中的附加源项封闭;能同时得到关于单个和多个相界面周围的详细物理信息;能够实现液固之间的双向耦合,兼顾电流变液微尺度流动现象的同时得到介电颗粒的微观结构。因此,该方法十分适合解决电流变液这一类的多相流动且相变复杂的问题。

2 微尺度流动格子 Boltzmann 方法

目前关于微尺度流动现象的研究已经有很多报道,微尺度流体流动规律与常规理论不一致,一些常规大尺度流动中可以忽略的因素(如速度滑移、表面力和静电力)在微尺度流动中可能占据主导地位,在微尺度流动中,由于特征尺度小、剪切速率低且流动阻尼大,即 Mach 和 Reynolds 数一般不大,从而导致各种不同于常规宏观流动现象的奇

异微尺度流动现象。由于格子 Boltzmann 方法是一种基于动力学的介观尺度流体计算方法,可以较好地处理上述问题,因此本文采用格子 Boltzmann 方法研究电流变悬浮液流动特性,探讨格子 Boltzmann 方法在电流变液研究中的应用。

本文运用双网格技术,用格子 Boltzmann 方法在标准网格下求解流场信息,用拉格朗日方法确定每个颗粒的位置和速度,这可以避免采用传统方法非结构化贴体网格需要重新划分网格的问题。液固相之间的相互作用则通过流体在颗粒边界的无滑移边界条件实现,可以充分考察颗粒周围的流动细节,十分便于研究液固两相流的作用机理。

2.1 微尺度流动中连续相流动控制模型

连续相的流动采用格子 Boltzmann 方法处理,流动区域划分成规则的正交网格,流体相用分布在格点上的流体粒子代表。由于速度空间也是离散的,流体粒子只能沿规定的方向迁移至邻近格点。本文采用 D2Q9 格子模型,如图 1 所示,该模型分布函数的演化方程为

$$f_i(x + e_i \Delta t, t + \Delta t) = f_i(x, t) + \frac{1}{\tau} [f_i^{eq}(\rho, v) - f_i(x, t)] \quad (1)$$

式中 $f_i(x, t)$ 为 t 时刻在格点 x 处 e_i 方向的密度分布函数, τ 为无量纲弛豫时间, Δt 为时间步长, $f_i^{eq}(\rho, v)$ 为 t 时刻 e_i 方向的平衡密度分布函数,见式(2)。

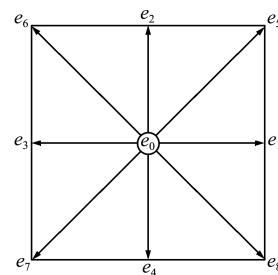


图 1 D2Q9 格子模型
Fig. 1 D2Q9 lattice model

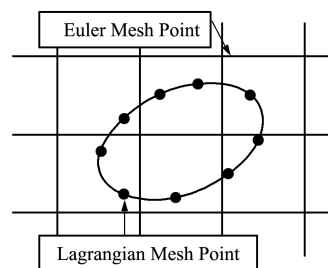


图 2 流场中颗粒边界格点分布
Fig. 2 Thick line is the boundary with solid circle symbol representing the boundary points

$$f_i^{eq}(\rho, v) = \omega_i \rho \left[1 + \frac{e_i \cdot v}{c_s^2} + \frac{1}{2} \frac{(e_i \cdot v)^2}{c_s^4} - \frac{1}{2} \frac{v \cdot v}{c_s^2} \right] \quad (i=0, 1, 2, \dots, 8) \quad (2)$$

式中 $c_s = 1/\sqrt{3}$, ω_i 为权系数。

LBM 求解的原始变量是格点上的粒子分布函数, 连续相的宏观密度与速度可由粒子分布函数求得, 具体关系式为

$$\begin{aligned} \rho(x, t) &= \sum_{i=0}^8 f_i(x, t) \\ \rho v(x, t) &= \sum_{i=0}^8 e_i f_i(x, t) \end{aligned} \quad (3)$$

2.2 微尺度流动中曲线边界的处理方法

介电颗粒在电场作用下的受力分析一直是电流变效应机理研究的重点与热点, 研究者们提出了多种机理模型来研究介电颗粒在电场作用下的受力与成链结构。从计算的观点看, 介电颗粒在外电场作用下, 由于极化主要受电场力 (f^e) 和来自连续相的液动粘滞阻力 (f^h) 的影响; 此外, 还有阻碍颗粒堆叠的短程排斥力 (f^r) 和由于热运动引起的布朗力 (R)。假设介电颗粒是大小一致的圆形硬球颗粒, 在一定的截止半径内随着所有这些力的解决, 基于牛顿第二定律, 单颗粒的运动方程为

$$M(dU_p/dt) = f^e + f^r + f^h + R = F_T \quad (4)$$

式中 M 为颗粒的质量, U_p 为颗粒的运动速度, t 为时间步长, F_T 为颗粒受到的合力。

电流变悬浮液的流动可视为微尺度流动, 微尺度流动因为一些表面力的作用表现出许多不同于宏观流动的新现象, 如流动阻尼力大, 尤其是在场作用下连续相对分散相的粘滞阻力又作为唯一的耗散力, 耗散颗粒从电场获得能量直至系统达到新的平衡^[19]。因此, 计算微尺度流动特征下液固之间复杂的相间作用力, 对进一步揭示电流变效应机理显得尤为重要。以往, 科研工作者都是采用斯托克斯公式进行近似替代计算, 在静态流场下液动力的表达式为

$$f^h = 3\pi\sigma\eta dr_i/dt \quad (5)$$

动态流场下液动力表达式为

$$f^h = 3\pi\sigma\eta(dr_i/dt - \dot{\gamma} z_i e_x) \quad (6)$$

式中 σ 为介电颗粒的直径, η 为流体的粘度, $\dot{\gamma}$ 为剪切速率。

由式(5,6)可以看出, 唯一的变量是颗粒在某一时间步内的速度, 即该力的变化仅与颗粒的运动速度有关, 但是随着微尺度流动理论及液固两相流模拟方法的不断进步与发展, 越来越多的研究表明

使用斯托克斯公式表征液动力不够精确。Klingenberg 等^[20]通过模拟结果与实验对比发现在剪切载荷作用下采用斯托克斯公式表征液动力时, 模拟结果与实验现象有较大差别。Yu 等^[21]在模拟时指出, 由于连续相的不可压缩性, 颗粒相互靠近时流体对颗粒的排挤作用很明显, 从而对颗粒的聚集产生十分重要的影响。Zhou 等^[22]在模拟液固两相流时的模拟结果也显示颗粒运动对颗粒周围的局部流体会有很明显的扰动作用, 相对速度可达到每秒几厘米的改变。由此可见, 连续相的流变特性尤其是在剪切速率高、流动阻尼大的情况下对颗粒的集聚起到十分重要的作用, 且在不同的区域这种作用也表现出不同, 但是在斯托克斯公式中并没有与连续相流变特性相关的因子。其次, 分子动力学方法只是对介电颗粒的动力学特性进行跟踪描述, 而电流变液的电流变效应是液固两相悬浮液共同作用缺一不可的行为, 连续相在相变过程中受颗粒运动等影响, 其流变特性也会发生一定的改变, 这种变化对整个体系响应过程的影响程度, 在基于分子动力学模型所开展的研究成果中未曾报道。

采用动量交换的方法计算液固相间作用力, 使用该方法时, 电流变悬浮液在场作用下不论是介电颗粒还是连续相的运动均发生改变, 这种改变终将在液固相间动量交换的过程中体现, 即介电颗粒的粘滞阻力会因这些变化而实时更新。其基本思想是将颗粒的表面视为液体中运动的边界, 采用侵入边界法, 底层欧拉网格描述流体的流动, 颗粒的大小和形状由拉格朗日格子描述, 如图 2 所示。对于运动颗粒曲线表面则采用 Niu 等^[23]提出的插值反弹边界方法处理。

拉格朗日坐标系下颗粒边界节点 X_l (图 2) 处的密度分布函数 $f_\alpha(X_l, t)$ 由前后标准格点的密度函数采用拉格朗日插值求得, 在边界点上的所有方向都采用反弹格式和无滑移边界条件, 在下一时间步构建一个新的密度分布函数为

$$f_\beta(X_l, t + \Delta t) = f_\alpha(X_l, t) - 2\omega_\alpha \rho(e_\alpha \cdot U_p/c_s^2) \quad (7)$$

式中 β 为与 α 相反的方向, U_p 为颗粒的速度。

在边界点 X_l 处作用力的分布函数可以通过动量交换方法求得

$$g(X_l, t) = \sum_{\beta} e_\beta [f_\beta(X_l, t) - f_\alpha(X_l, t)] \quad (8)$$

作用在该点处对颗粒的液动作用力即可求得

$$F(X_l, t) = -g(X_l, t) \quad (9)$$

由于力的相互作用, 该力对流体的作用通过一个光滑的 δ 函数进行描述:

$$F(r_{ij}, t) = \sum_l g(X_l, t) D_{ij}(r_{ij} - X_l) \Delta s \quad (10)$$

式中 Δs 为朗格朗日坐标下颗粒边界两节点之间的圆弧长度。

作用在颗粒上的总液动力:

$$F_T^H = \sum_l F(X_l, t) \Delta s \quad (11)$$

由此,可以看出使用动量交换的方法,不仅可以 根据颗粒周围流体的流变特性(速度和密度)和 颗粒本身的速度实时更新颗粒在每一个时间步内 受到的液动力,还能够通过力的相互作用实时更新 颗粒周围流体的流变特性,计算出来的相间作用力 将更加精确。

3 结果与讨论

从图 3 可以看出模拟域中颗粒的位置与系统的 微尺度流动信息,随着时间的推移,介电颗粒沿 着电场方向从随机排列的无序状态转变成链状

结构。还可以发现在颗粒周围流体的流变特性发 生了不同程度的改变,尤其以两颗粒之间的变化尤 为明显,这种改变必定会对颗粒的运动和微观序化 结构造成一定的影响。这正是分子动力学方法所 难以描述的,如果采用其他两相流模拟方法又必须 面对求解复杂微分方程和网格划分等问题;而使用 格子 Boltzmann 方法,不仅可以得到因颗粒运动造 成的局部流体流动信息的改变量,同时考虑了在双 向耦合过程中连续相流动特性的改变对颗粒运动 的影响,大大提高了模拟真实性。

从图 4 可以看出颗粒的成链状况与载液的流动 信息,随着时间的推移,颗粒链慢慢从长链打断 重组成为许多短链,最后形成层状结构,在这一过程 中同样可以看到连续相的流动特性发生了明显变 化,即不仅可以看到整个体系微尺度空间的物理变 化,还可以看到颗粒亚微观序化结构的改变。

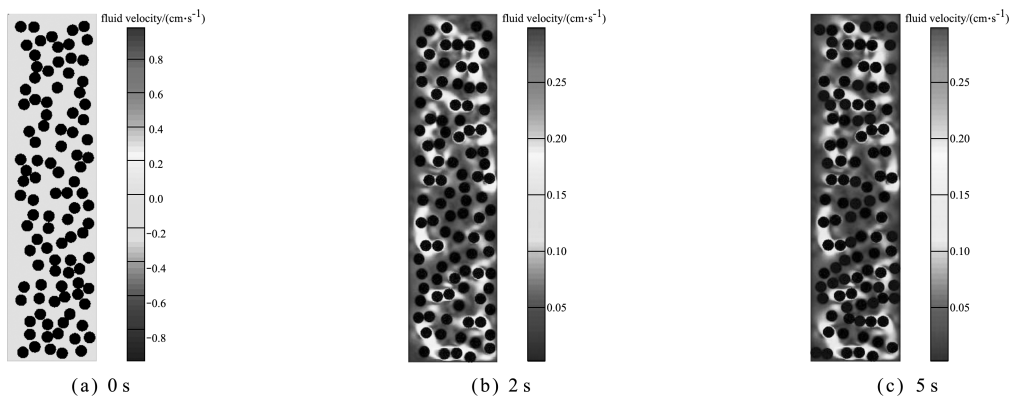


图 3 电场强度 $E = 5 \text{ kV/mm}$ 时的计算机模拟结果
Fig. 3 Simulation results when $E = 5 \text{ kV/mm}$

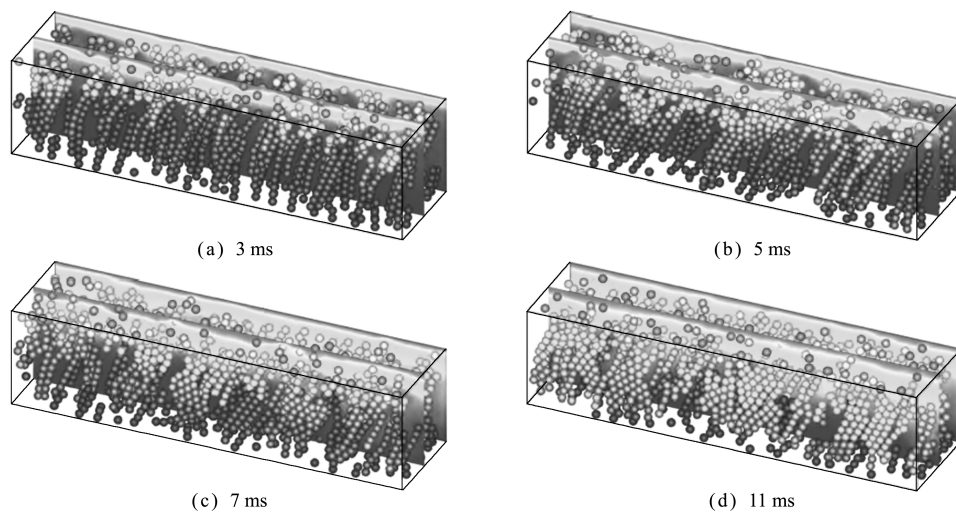


图 4 剪切速率 $\gamma = 240 \text{ s}^{-1}$ 时不同时刻的模拟结果
Fig. 4 Simulation results at $\gamma = 240 \text{ s}^{-1}$

4 结 论

本文针对电流变悬浮液的微尺度流动特性,提出了基于介观动理论的格子 Boltzmann 方法,建立了电流变悬浮液两相流动的离散颗粒运动模型,解决了分子动力学难以描述的因颗粒运动造成局部流场流变特性改变的难题,和该流场双向耦合过程中对颗粒运动的影响,使得模拟过程快速简单且更加接近实际。

参考文献(References):

- [1] Winslow W M. Induced fibrillation of suspensions[J]. *J Appl Phys*, 1949, **20**(12): 1137-1140.
- [2] Zhang W L, Choi H J. Stimuli-responsive polymers and colloids under electric and magnetic fields [J]. *Polymers*, 2014, **6**(11): 2803-2818.
- [3] Nguyen Q H, Choi S B. Dynamic modeling of an electrorheological damper considering the unsteady behavior of electrorheological fluid flow[J]. *Smart Mater Struct*, 2009, **18**(5): 16-24
- [4] Esteki K, Bagchi A, Sedaghati R. Dynamic analysis of electro- and magneto-rheological fluid dampers using duct flow models [J]. *Smart Materials and Structures*, 2014, **23**(3): 035016.
- [5] Sheng P, Wen W J. Electrorheology: Statics and dynamics [J]. *Solid State Communications*, 2010, **150**(21): 1023-1039.
- [6] Kadaksham J, Singh P, Aubry N. Dynamics of electrorheological suspensions subjected to spatially non-uniform electric fields [J]. *Journal of Fluids Engineering*, 2004, **126**(2): 170-176.
- [7] Tao R. Structure and dynamics of dipolar fluids under strong shear [J]. *Chemical Engineering Science*, 2006, **61**(7): 2186-2190.
- [8] Cao J G, Huang J P, Zhou L W. Structure of electrorheological fluids under an electric field and a shear flow; experiment and computer simulation [J]. *J Phys Chem B*, 2006, **110**(24): 11635-11639.
- [9] Enomoto Y, Oba K. Simulation of structures and their rheological properties in electrorheological fluids [J]. *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*, 2002, **309**(1): 15-25.
- [10] Ghaffari A, Hashemabadi S H, Ashtiani M. A review on the simulation and modeling of magnetorheological fluids [J]. *Journal of Intelligent Material Systems and Structures*, 2015, **26**(8): 881-904.
- [11] Kang T G, Gao Y, Hulsen M A, et al. Direct simulation of the dynamics of two spherical particles actuated magnetically in a viscous fluid [J]. *Computers & Fluids*, 2013, **86**: 569-581.
- [12] Zhang J, Gong X, Liu C, et al. Electrorheological fluid dynamics [J]. *Physical Review Letters*, 2008, **101**(19): 194503.
- [13] Seo Y P, Seo Y. Modeling and analysis of electrorheological suspensions in shear flow [J]. *Langmuir*, 2012, **28**(6): 3077-3084.
- [14] Pappas Y, Klingenberg D J. Simulations of magnetorheological suspensions in Poiseuille flow [J]. *Rheologica Acta*, 2005, **45**(5): 621-629.
- [15] Ladd A J C. Numerical simulations of particulate suspensions via a discretized Boltzmann equation (part 1) theoretical foundation [J]. *J Fluid Mech*, 1994, **271**(1): 285-309.
- [16] Bouzidi M, Firdaouss M, Lallemand P. Momentum transfer of a Boltzmann-lattice fluid with boundaries [J]. *Physics of Fluids*, 2001, **13**(11): 3452-3459.
- [17] 聂德明, 郑梦娇, 高原, 等. 并列双椭圆柱绕流的格子 Boltzmann-虚拟区域方法的模拟研究 [J]. *计算力学学报*, 2014, **31**(4): 517-525. (NIE De-ming, ZHENG Meng-jiao, GAO Yuan, et al. Numerical investigation of flow past two elliptical cylinders in side-by-side arrangement via lattice Boltzmann-fictitious domain method [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2014, **31**(4): 517-525. (in Chinese))
- [18] Han K, Feng Y T, Owen D R J. Coupled lattice Boltzmann and discrete element modelling of fluid-particle interaction problems [J]. *Computers and Structures*, 2007, **85**(11): 1080-1088.
- [19] 刘耕, 陈涛, 刘震宇. 基于格子-波尔兹曼法的流体能耗求解 [J]. *计算力学学报*, 2015, **32**(3): 378-382. (LIU Geng, CHEN Tao, LIU Zhen-yu. Numerical evaluation of viscous energy dissipation of fluid using lattice Boltzmann method [J]. *Chinese Journal of Computational Mechanics*, 2015, **32**(3): 378-382. (in Chinese))
- [20] Klingenberg D J, van Swol F, Zukoski C F. The small shear rate response of electrorheological suspensions (II) Extension beyond the point-dipole limit [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 1991, **94**(9): 6170-6178.
- [21] Yu Z, Fan L S. Lattice Boltzmann method for simulating particle-fluid interactions [J]. *Particology*,

2010, **8**(6):539-543.

- [22] Zhou G F, Wang L M, Wang X W, et al. Direct numerical simulation scheme for particle-fluid systems based on a time-driven hard-sphere and the lattice Boltzmann method[J]. *Chinese Sci Bull (Chinese Ver)*,

2011, **56**(16):1246-1256.

- [23] Niu X D, Shu C, Chew Y T, et al. A momentum exchange-based immersed boundary-lattice Boltzmann method for simulating incompressible viscous flows [J]. *Physics Letters A*, 2006, **354**(3):173-182.

Dynamic modeling and numerical simulation of electro-rheological fluids based on Lattice Boltzmann Method

ZHU Shi-sha* , LUO Qi, LIU Jin-gang, TANG Tao

(School of Mechanical Engineering, Xiangtan University, Xiangtan 411105, China)

Abstract: Since the fast response of the internal structure of the electro-rheological (ER) suspension fluids occur in the controlled space (electrode distance is generally 1 mm~2 mm) of the applied electric field, where the main feature of the ER suspension fluids in the certain time and spatial scales is low shear rate but high flow resistance, which means the Mach number and the Reynolds number are generally small, it can be considered as micro-scale flow. According to this characteristic, the author proposed a discrete-particle-motion model of the ER suspension flows based on the Lattice Boltzmann Method (LBM) of the Mesoscopic kinetic theory. The results of the dynamic simulation showed that the model solved the problem of describing the changes of the rheological properties of some local flow fields and the influences on the particle movement during the two-way coupling in this flow field.

Key words: electro-rheological effect; electro-rheological suspensions; micro-scale flow; Lattice Boltzmann Method