

电流变液泊肃叶流动中的分子动力学模拟*

高向阳¹⁾ 赵晓鹏^{1,2)} 郑长卿¹⁾

¹⁾ 西北工业大学电流变技术研究所, 西安 710072)

²⁾ 中国科学院国际材料物理中心, 沈阳 110015)

(1998 年 11 月 23 日收到; 1999 年 6 月 5 日收到修改稿)

用分子动力学模拟方法研究了电流变液泊肃叶流动中颗粒的运动方式, 模拟出的速度剖面分为两个区域, 靠近电极区域的颗粒表现为呼吸式的跃迁运动形式, 称为跃迁区, 而在两个电极中间区域则为平稳运动方式, 称为柱塞区. 此外模拟出了体积流率与相对压力梯度之间的关系, 并分析了临界压力梯度和临界电场强度及阻断流动的影响因素.

PACC: 4760; 6620; 4750; 6210

1 引 言

电流变液阀门一类装置在轴向压力作用下的泊肃叶流动方式是电流变液的主要工作状况之一. 目前对电流变液泊肃叶流动的研究仅限于连续介质假定^[1,2]. 连续介质假定的基础是所研究问题的特征尺度和特征时间与分子间的距离及碰撞时间相比大得不可比拟, 个别分子的行为几乎不能影响大量分子统计平均后的宏观物理量^[3,4]. 但是电流变液中分散颗粒的直径在微米级而且在电场作用下电流变液形成疏密不均的链柱结构. 在以前研究电流变液多链相互作用工作^[5]的基础上, 我们认为将电场作用下的电流变液看做一个离散颗粒体系似乎更为合理. 本文用分子动力学模拟的方法, 对每个颗粒建立运动方程, 研究这个离散颗粒体系的流变行为.

2 模型和模拟方法

研究距离为 h 的两平行电极平板之间的流体, 由于 x 方向的压力梯度 p' 引起的定常流动, 如图 1(a), 电极平板宽度为 b , 长度为 L , 都远大于电极板之间的距离. 因此可以忽略边缘效应, 电极之间作为均匀电场, 所研究的问题可以看作一个二维情况(图 1(b)). 流体截面的速度分布^[3,4], $u = \frac{p'}{2\eta}z(h-z)$, 其中 η 是液体的粘度.

颗粒体积比较小时, 无电场时的液体仍可看作连续介质. 在电场作用下, 采用偶极模型两个颗粒之间的相互作用力为^[6]

$$F_{ij}(\mathbf{R}_{ij}) = \frac{3p^2}{4\pi\epsilon_0 K_f R_{ij}^4} \cdot [(3\cos^2\theta_{ij} - 1)\mathbf{e}_r - \sin(2\theta_{ij})\mathbf{e}_\theta] \quad (1)$$

$$\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j, \quad 0 \leq \theta_{ij} \leq \pi/2,$$

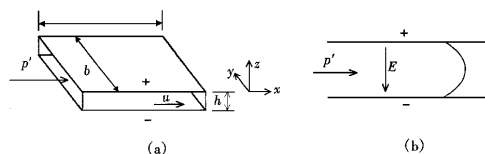


图 1 泊肃叶流动示意图

颗粒之间的短程排斥力随颗粒之间距离的增加而迅速衰减, 本文采用幂指数形式^[7], 即

$$F_{ij}^{\text{rep}}(\mathbf{R}_{ij}) = -\frac{3p^2}{4\pi\epsilon_0 K_f R_{ij}^4} \exp[-100(R_{ij}/\delta - 1)]\mathbf{e}_r, \quad (2)$$

颗粒和其映像偶极之间也存在相互作用, 颗粒所受的总的镜像力为

$$F_i^{\text{self}} = \frac{3}{8} \frac{p^2}{4\pi\epsilon_0 K_f} \left\{ -\frac{1}{z_i^4} + \sum_{s=1}^{\infty} \left[\frac{1}{(z_i - sL_z)^4} - \frac{1}{(z_i + sL_z)^4} \right] \right\} \mathbf{e}_z \quad (3)$$

* 国家自然科学基金重点项目(批准号: 59832090)和航空科学基金资助的课题.

考虑到典型情形时惯性项系数约为 $O(10^{-10})$, 在颗粒运动速度较小时, 忽略颗粒的惯性力和布朗力, 在压力梯度 p' 和电场强度的作用下, 颗粒的运动方程为

$$\sum_{j \neq i} [F_{ij}(\mathbf{R}_{ij}) + F_{ij}^{\text{rep}}(\mathbf{R}_{ij})] + F_i^{\text{self}} - 3\pi\delta\eta \left[\frac{d\mathbf{R}_i}{dt} - \frac{p'}{2\eta} z(h-z)\mathbf{e}_x \right] = 0, \quad (4)$$

无量纲化后得

$$\frac{d\mathbf{R}_i^*}{dt^*} = \sum_{j \neq i} [F_{ij}^*(\mathbf{R}_{ij}^*) + F_{ij}^{\text{rep}*}(\mathbf{R}_{ij}^*)] + F_i^{\text{self}*} + S^* \frac{z_i^*(h^* - z_i^*)}{2} \mathbf{e}_x, \quad i, j = 1, 2, \dots, M \quad (5)$$

M 是颗粒数. 无量纲因子为, 长度 $\sim \delta$, 作用力 $\sim F_0$, 时间 $\sim 3\pi\eta\delta^2/F_0$,

$$S^* = \frac{3\pi\eta\delta^2}{F_0} \cdot \frac{p'\delta}{\eta} = \frac{16}{\epsilon_0 K_f (\beta E)^2} \cdot p'\delta, \quad (6)$$

S^* 为无量纲的压力梯度, 称为相对压力梯度.

图 2 是进行模拟的结构图. 取模拟元胞 $L_x \times L_z = 2 \times 30$, 完整长链颗粒数为 30, 其中包含电场作用

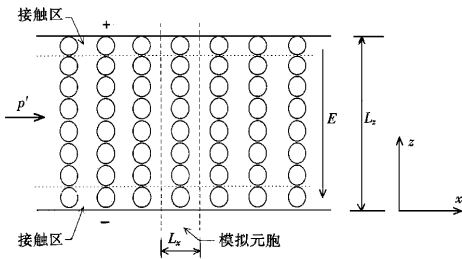


图 2 模拟元胞结构示意图

下形成的一条完整长链, 在其左右各取周期分布的长链 5 条, 以模拟在水平方向上形成的无限多条的长链. 基于实验观察^[8], Ashurst^[9]和 Parthasarathy^[10]在模拟过程中假设电极板附近有一接触区, 其中的颗粒与电极之间无滑移. 据此本文取接触区厚度为一个颗粒半径, 与电极板相接触的颗粒静止不动. 未加电场时, 长链中颗粒的速度剖面就表征了流体的速度剖面.

某时刻单位长度上的体积流量为

$$Q^* = \int_0^{h^*} \frac{dR_i^*}{dt^*} dz^*. \quad (7)$$

零电场时的体积流量为

$$Q_0^* = \frac{S^* h^{*3}}{12} = \frac{\pi h^3 p'}{4 \pi \epsilon_0 K_f \delta^2 (\beta E)^2}, \quad (8)$$

时间步长取为 0.01, 采用四阶龙格库塔法求解方程 (5).

3 模拟结果及讨论

图 3 是模拟所得的不同相对压力梯度时体积流量随时间的变化关系. 图 3(a) 是相对压力梯度为 $S^* = 0.001 \sim 0.005$ 的情形, 图 3(b) 是相对压力梯度为 $0.00025 \sim 0.00075$ 的情形. 随着压力梯度增大, 体积流量持续增加. 图 3(b) 表明, 在相对压力梯度小于 0.00075 时, 体积流量随时间单调减小到零, 即流动被阻断. 图 3(a) 则表明, 在相对压力梯度大于 0.001 时, 体积流量随时间的增加并不是单调减小, 在减小到最小值后, 体积流量呈现脉动周期变化, 其时间间隔随压力梯度的增加而减小.

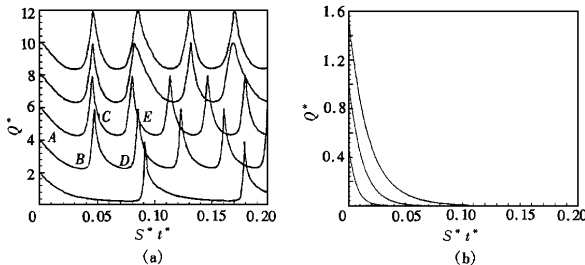


图 3 体积流量随时间的变化关系

(a) 从下到上依次为 $S^* = 1 \times 10^{-3}, 2 \times 10^{-3}, 3 \times 10^{-3}, 4 \times 10^{-3}, 5 \times 10^{-3}$ (b) 从下到上依次为 $S^* = 0.25 \times 10^{-3}, 0.50 \times 10^{-3}, 0.75 \times 10^{-3}$



3.1 颗粒的运动方式

图 4(b)是无量纲压力梯度 $S^* = 0.002$ 时不同时刻颗粒的速度剖面. 作为一个例子现在具体地研究 $S^* = 0.002$ 的情形. $t^* = 0$ 时速度剖面为曲线 a , 对应图 3(a)中的 A 点, 此时加上电场, 颗粒的速度随时间而减小, 其速度剖面在以曲线 a 为包线的“区域 I”内单调变化, 中央颗粒速度减小较快, 两边颗粒速度减小较慢, 中央部位的颗粒速度趋于相同. 体积流量逐渐减小. 直到 $t^* = 18.5$ 时到达曲线 b , 对应图 3(a)中的 B 点, 瞬时体积流量达到最小值.

随后, 靠近两个电极板的颗粒(不在电极板接触区内)速度变化剧烈, 在一个较短的时间里迅速增大, 然后迅速减小, 而在此期间中间部位的颗粒速度变化幅度很小. 具有最大颗粒速度的曲线 c , 对应着图 3(a)中的 C 点, 此时出现最大的瞬时体积流量, 然后各个颗粒的速度继续减小, 重新达到速度剖面曲线 b , 此时对应着图 3(a)中的 D 点. 如此重复下去. 把从 $B-C-D$ 过程中速度剖面图形所形成的包络线围成的区域记做“区域 II”, 发现此后每一时刻的速度剖面都在区域 II 内并和图 3(a)一样呈周期变化.

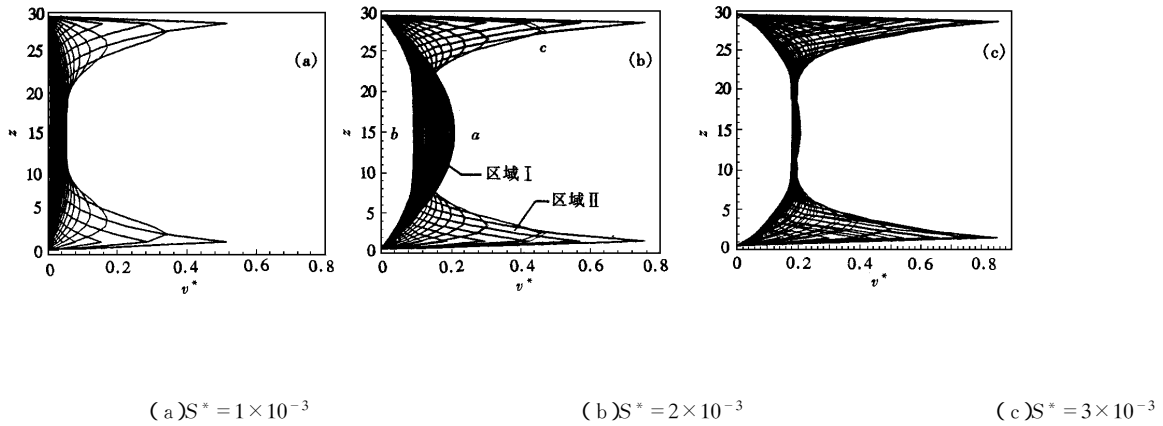


图 4 速度剖面包络区(区域 II)

图 4 中速度剖面形成的区域 II 可称为“速度剖面包络区”. 中间区域颗粒速度几乎相同, 并且随着时间变化很小, 颗粒以整体向前移动. 这和连续介质力学方法所得结果类似, 把这一区域称为“柱塞区”, 它是速度比较稳定的区域. 两端区域颗粒速度在某一时间段里变化剧烈, 称为“跃迁区”. 这是由于两端区域的颗粒与接触区内的颗粒之间有较强的相互作用, 因而在颗粒远离接触区内的颗粒时, 颗粒所受吸引力方向与运动方向相反, 速度降低. 当颗粒靠近接触区内的颗粒时, 颗粒所受吸引力方向与运动方向相同, 速度增加. 和中间区域的颗粒的平稳运动不同, 跃迁区内的颗粒表现为“呼吸式”的跃迁运动形式. 这一现象和实验观察中经常出现的“弹球现象”是一致的. 应该指出的是, 连续介质力学方法不考虑单个颗粒的运动方式, 只考虑大量粒子综合表现的宏观运动特性, 因而不能解释“弹球效应”这种运动突变形式.

可得平均体积流量

$$\bar{Q}^* = \frac{1}{nT} \int_{t_0}^{nT+t_0} Q^*(t^*) dt^* \quad (9)$$

其中 t_0 为任一时刻, T 是体积流量周期. 平均体积流量代表了电场作用下的宏观体积流量. 令 $\alpha = \frac{\bar{Q}^*}{Q_0^*}$ 称为体积流率, 是有电场时的平均体积流量与无电场时的体积流量的比率. 体积流率在 0—1 之间变化, 这一参量可以反映电场对体积流量的控制能力.

图 5 是体积流率与相对压力梯度的关系. 可以看出, 存在一个压力梯度门槛值 S_0^* , 当 $S^* < S_0^*$ 时, 体积流率为零, 流动被电场完全阻断. 根据体积流率随相对压力梯度变化的特点, 构造函数

$$\alpha = \begin{cases} \left(1 - \frac{c}{S^*}\right)^n \left(1 + \frac{c_1}{S^*}\right) & S^* > c \\ 0 & S^* \leq c \end{cases} \quad (10)$$

其中 c 为相对压力梯度门槛值, 由图 5 可知 c 应在 $0.75 \times 10^{-3} - 0.90 \times 10^{-3}$ 之间. 为保证 α 总小于 1, 可以证明 $n=1$ 时, 必须 $c_1 \leq c$; $n=2$ 时, 必须 $c_1 \leq 2c$.

3.2 体积流率及门槛值

对瞬时体积流量在时间周期上进行统计平均,

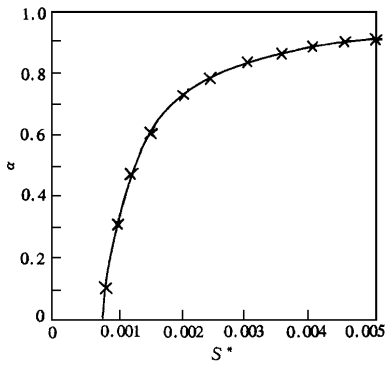


图5 体积流率与相对压力梯度的关系
×为计算值;—为(10)式的曲线

经过对参数的调整,发现体积流率和压力梯度符合上述关系式的参数为: $n=1$, $c=0.78 \times 10^{-3}$, $c_1=c/2$.

图5所示模拟的体积流率与(10)式有很好的符合,因此我们可以确定式中的参数 0.78×10^{-3} 即是体积流率的门槛值.由于用计算机分子动力学模拟只能针对给定的压力梯度进行计算,它可以指出体积流率门槛值的取值范围,但很难给出具体的值.因此(10)式就显得很有帮助并且十分方便.由上式和(6)式可知减小 $p'\delta$,即减小作用于颗粒上的压力梯度,以及增大电场强度都使体积流率减小.由于(10)式用到的无量纲压力梯度没有直接反映电极之间的几何因子,因而采用体积流量来代替.体积流量反映了压力梯度和几何尺寸的共同影响,可以消除因模拟体系中颗粒数的选取对近似公式中参数的选取.在给定一个模拟体系中压力梯度和体积流量是一一对应的,由压力梯度的门槛值可以得到体积流量的门槛值为 $c_Q = \frac{ch^*3}{12} = 1.5853$,其中 h^* 是模拟体系中电极板之间除去两端接触区的长度.

于是(10)式可以改写为

$$\alpha = \begin{cases} \left(1 - \frac{c_Q}{Q_0^*}\right) \left(1 + \frac{c_Q}{2Q_0^*}\right) & Q_0^* > c_Q, \\ 0 & Q_0^* \leq c_Q, \end{cases} \quad (11)$$

式中, Q_0^* 是零场时的体积流量.上式和(8)式显示,体积流量是压力梯度倒数的二次方函数.

由临界体积流量可以得到以下两个临界值:

(1) 临界电场强度

$$E_{cr} = \sqrt{\frac{\pi h^3 p'}{4 \pi \epsilon_0 K_f \delta^2 \beta^2 c_Q}}, \quad (12)$$

可见,对于给定的一种电流变液材料,临界电场强度随着压力梯度的增大而增大,在不改变压力梯度的情况下,为减小临界电场强度,可采取减小电极之间距离以及采用尺寸稍大的分散颗粒的办法,当然增大颗粒尺寸只能在微观尺度进行.应当保证在无电场时颗粒的存在不致影响流体的流动.

(2) 临界压力梯度

$$P'_{cr} = \frac{c_Q}{\pi h^3 / 4 F_0} = \frac{c_Q}{\pi h^3 / \left(\frac{3}{4} \pi \epsilon_0 K_f \delta^2 \beta^2 E_0^2\right)}, \quad (13)$$

可以看出,临界压力梯度与电场强度、电极之间的距离和颗粒的尺寸有关.减小电极之间的距离,增大电场强度或者适当增大颗粒的尺寸都能提高压力梯度临界值.

4 结 论

1. 在电场作用下,两个电极板之间处于中间区域的颗粒以等速作柱塞流动,靠近电极板接触区域的颗粒则以“呼吸式”的跃迁形式运动.随着电场强度的增加,柱塞区速度减小,体积流量减小.存在一个临界电场或临界压力梯度.在压力梯度小于临界压力梯度或电场强度大于临界电场强度后,流动被阻断.

2. 体积流率与压力梯度,电极板之间的距离,颗粒尺寸和电场强度有关.通过减小电极之间的距离,增大电场强度以及适当增大颗粒的尺寸能够使体积流率减小,提高压力梯度的临界值.

3. 体积流率与相对压力梯度的倒数呈二次函数的关系,其形式可以写为 $\alpha = \left(1 - \frac{c}{S^*}\right) \left(1 + \frac{c}{2S^*}\right)$, $S^* > c$,与未加电场时的相对体积流量亦有类似的关系.

4. 当相对压力梯度小于临界值时,电场阻断流体流动响应时间仅与电场强度、液体粘度及电极之间的距离有关,而与压力梯度关系不大.

- [1] K. R. Rajagopal, A. S. Wineman, *Acta Mechanica*, **91**(1992), 57.
[2] R. J. Atkin, Xiao Shi, W. A. Bullough, *J. Rheol.*, **35**(1991), 1441.

- [3] 吴望一, 流体力学(北京大学出版社, 北京, 1982)p. 81—91
[Wu Wangyi, Fluid Mechanics(Beijing University Press, Beijing, 1982)p. 81—91(in Chinese)].
- [4] Chia-Shun Yih, Fluid Mechanics, McGraw-Hill Book Company 1969 p. 1—8, 225—227.
- [5] X. Y. Gao, X. P. Zhao, C. Q. Zheng, *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **31**(1998), 3397.
- [6] J. M. Sun, R. Tao, *Physical Review*, **E52**(1)(1995) 813.
- [7] J. R. Melrose, *Phys. Rev.*, **A44**(1991), R4789.
- [8] D. J. Klingenberg, C. F. Zukoski, Studies on the steady-state behavior of electrorheological suspensions, *Langmuir* 1990, 6: 15—24.
- [9] W. T. Ashurst, W. G. Hoover, *Phys. Rev. Lett.*, **73**(1994), 205.
- [10] M. Parthasarathy, K. H. Ahn, B. M. Belongia and D. J. Klingenberg, The role of suspension structure in the dynamic response of electrorheological suspensions, *Electrorheological fluids*, edited by R. Tao and G. D. Roy, World scientific press, Singapore, 1994.

THE MOLECULAR DYNAMIC SIMULATIONS IN POISEULLI FLOWS OF ERF*

GAO XIANG-YANG¹⁾ ZHAO XIAO-PENG^{1,2)} ZHENG CHANG-QING¹⁾

¹⁾ *Institute of Electrorheological Technology, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072*

²⁾ *International Center for Materials Physics, Chinese Academy of Sciences, Shenyang 110015*

(Received 23 November 1998 ; revised manuscript received 5 June 1999)

ABSTRACT

We investigate the movement of particles in ERF that is under Poiseulli flow by virtue of molecular dynamic simulations. The velocity profile of particles we simulated is divided into two zones. The zone near the electrodes where the particle velocity profile changes periodically like breathing type, we called it the transition zone. The zone between the two electrodes where particles move smoothly as a plug, we called it the plug zone. In addition, we also simulate the relationship between volume flow rate and relative pressure gradient. We then analyze the factors that influence the volume flow rate, critical electric field, critical pressure gradient and the response time of shutting flow respectively.

PACC : 4760 ; 6620 ; 4750 ; 6210