

磁性液体数值模拟研究进展

裴雷, 龚兴龙, 宣守虎*

中国科学技术大学近代力学系, 中国科学院复杂系统力学卓越创新中心, 中国科学院材料力学行为和设计国家重点实验室, 合肥 230027

* 联系人, E-mail: xuansh@ustc.edu.cn

2018-10-31 收稿, 2019-01-25 修回, 2019-01-25 接受, 2019-04-04 网络版发表

摘要 磁性液体(magnetic fluid)是一种力学性能受磁场调控的磁流变智能材料, 在医学与工业生产中有广泛应用. 近年来, 随着计算机性能的发展, 数值模拟日益成为研究磁性液体力学行为微观机理的重要方法. 本文综述并评价了磁性液体理论与数值模拟领域的最新研究进展, 介绍了磁性液体在剪切、挤压和阀模式3种工作模式下的力学模型, 对磁性液体的现有模拟方法进行了总结, 讨论了磁性液体数值模拟的研究现状, 并展望了数值模拟的发展前景. 磁性液体的数值模拟亟待开展以下三方面研究: (1) 建立涵盖多种微观相互作用的精细理论模型, 研究颗粒表面包覆、添加剂等非磁性成分对磁流变效应的影响; (2) 将不同数值模拟方法相结合, 建立磁性液体的多尺度模型, 进一步提高模拟精度, 利用机器学习协调不同尺度的数值模拟, 压缩计算量, 已成为一种可行思路; (3) 将力学模型与电、磁学模型相结合, 发展多尺度、多物理场耦合的数值模拟方法, 模拟磁性液体其他物理性能. 最终为高性能磁性液体的研制及其应用研究提供技术和理论支撑.

关键词 磁性液体, 磁流变, 力学性能, 力学模型, 数值模拟

磁性液体(magnetic fluid)是一种由磁性颗粒、非磁性基体和添加剂组成的固-液两相智能材料^[1]. 无外磁场时, 磁性液体表现出基体的流体性质; 施加外磁场后, 其黏度、储能模量等力学性能会迅速($\sim 10^{-3}$ s)增大几个数量级, 且受到外磁场的调控, 这一现象称之为磁流变效应^[2]. 撤去外磁场后, 磁性液体恢复到初始状态. 可逆可控的磁流变效应使得磁性液体广泛应用在药物靶向输运、磁共振成像、磁流变抛光、阻尼器、车辆悬架等领域^[3-8]. 理想的磁性颗粒应具有饱和磁化强度高、粒径适中、化学稳定性好、抗沉降、便于制备等优点. 常用的磁性颗粒有羰基铁粉, Fe_3O_4 , $\gamma\text{-Fe}_2\text{O}_3$ 等^[9-11]. 根据颗粒磁化特性和粒径的不同, 磁性液体可分为磁流变液(magnetorheological fluid, MR fluid)、铁磁流体(ferrofluid)和生物磁流体(biomagnetic fluid). 其中以人体血液为代表的生物磁流体, 在外磁场作用下发生极化, 表现出微弱的导电

性^[12]. 这一响应区别于传统磁性液体, 其中的多物理场耦合作用、能量输运现象等, 近年来成为了研究热点之一.

磁性液体的力学性能与内部结构密切相关. 研究表明, 施加外磁场后, 磁性颗粒排布成链状、簇状或者复杂的网状结构; 颗粒间相互作用、颗粒在基体中的重新排布是磁流变效应产生的主因^[13]. 为了研究磁流变机理, 更好地指导器件设计, 前人提出了诸多理论模型. 其一是基于实验数据的经验模型, 例如Bingham模型、Herschel-Bulkley模型等. 这类模型适用于分析实验结果、设计器件, 但在预报磁性液体在未知磁场下的力学性能时遇到了困难. 因此研究人员从物理定律出发, 提出了微观模型, 即分别分析颗粒与基体的受力和运动, 通过统计平均求得宏观物理量. 理论模型原则上可求解任意问题, 然而工业器件中, 磁性液体所处的磁场环境、流动状态十分复杂,

引用格式: 裴雷, 龚兴龙, 宣守虎. 磁性液体数值模拟研究进展. 科学通报, 2019, 64: 1567-1582

Pei L, Gong X L, Xuan S H. Recent progress on the simulation technology of magnetic fluid (in Chinese). Chin Sci Bull, 2019, 64: 1567-1582, doi: 10.1360/N972018-01068

由于计算量的限制,理论模型常用于二维、轴对称等特殊情况.

近年来,随着计算机性能的提高,采用数值方法求解理论模型成为一种研究磁性液体机理的重要方法.常用的模拟方法有分子动力学(molecular dynamics simulation, MD)、颗粒动力学(particle-level dynamic simulation)、计算流体力学(computational fluid dynamics, CFD)方法、有限元法(finite element method, FEM)和Monte Carlo法等^[14-18].通过将模拟出的力学性能以及内部结构与实验对比,可以解释实验现象,预报材料性能,进而为材料制备和器件设计提供指导.特别地, Bahiuddin等人^[19]发展了磁流变液的机器学习(machine learning)模拟方法.在已知特定磁场下的流动曲线时,可以预报未知磁场下的流动曲线,达到了较高的精度.

综上所述,数值模拟是一种有良好前景的磁性液体研究方法.面向提高磁流变效应和改善沉降性这两大研究目标,数值模拟需要涉及不同颗粒材料、形状、微结构、不同基体种类、不同载荷形式等,对模拟精度也提出了更高要求.本文综述了国内外课题组在相关领域的研究进展,并对今后工作进行了展望.

1 磁性液体力学模型

磁性液体的工作模式可分为剪切模式、挤压模式和阀模式^[2],各种流动模式下磁性液体的力学模型是数值模拟的基础.

1.1 剪切模式下的力学模型

剪切模式下,磁性液体处于平面Couette流动状态,如图1(a)所示^[13],重点关注上下平板的剪应力 τ 与剪切率 $\dot{\gamma}$ 的关系.1919年, Bingham提出了塑性流体模型,认为屈服后剪应力是剪切率的线性函数:

$$\begin{cases} \dot{\gamma} = 0 & \text{if } \tau < \tau_y, \\ \tau = \tau_y + \eta_p \dot{\gamma} & \text{if } \tau \geq \tau_y, \end{cases} \quad (1)$$

其中, τ_y 为屈服应力.表观黏度 $\eta_{app} = \tau_y / \dot{\gamma} + \eta_p$, 当 $\dot{\gamma} \rightarrow \infty$ 时, $\eta_{app} \rightarrow \eta_p$ ^[21].如果磁性液体在屈服之后表现出剪切变稀或剪切增稠现象,可用Herschel-Bulkley模型来描述^[22]:

$$\tau = \tau_y + k \dot{\gamma}^n, \quad (2)$$

其中, k 和 n 分别为稠度系数和幂律指数.工业器件中,

磁性液体往往是一部分已经开始流动同时另一部分尚未屈服,在应用式(1)时,未屈服的部分表观黏度为无穷大,给数值模拟带来了困难.因此,研究者们提出了Bingham模型^[23,24]:

$$\tau = \left[\eta_p + \tau_y \frac{1 - \exp(-m\dot{\gamma})}{\dot{\gamma}} \right] \dot{\gamma}, \quad (3)$$

其中, m 是一个大数,以确保在剪切率趋于0时,表观黏度趋于一个有限值.磁性液体的部分屈服现象也可用双黏度模型表征^[25,26]:

$$\begin{cases} \tau = \eta_0 \dot{\gamma} & \text{if } \dot{\gamma} < \dot{\gamma}_0, \\ \tau = \tau_y + \eta_p \dot{\gamma} & \text{if } \dot{\gamma} \geq \dot{\gamma}_0, \end{cases} \quad (4)$$

其中, η_0 是屈服前的黏度;屈服剪切率 $\dot{\gamma}_0 \approx \tau_y / \eta_0$ 通常是一个小量.前人在研究印刷用油墨的流动曲线时,提出了一种双参数经验模型^[27],同样适用于磁性液体:

$$\begin{cases} \dot{\gamma} = 0 & \text{if } \tau < \tau_0, \\ \sqrt{\tau} = \sqrt{\tau_y} + \sqrt{\eta_c \dot{\gamma}} & \text{if } \tau \geq \tau_0, \end{cases} \quad (5)$$

其中, η_c 为稠度系数.文献[28,29]中还常采用3参数的Robertson-Stiff模型,3参数流变本构模型,形式如下:

$$\tau = k (\dot{\gamma}_0 + \dot{\gamma})^{n_p}, \quad (6)$$

其中, k 为稠度系数, n_p 是流变指数, $\dot{\gamma}_0$ 为剪切率修正系数.

此外,研究者还从颗粒间作用力出发,提出了磁性液体剪切模式的细观力学模型,如图1(b)所示^[20].磁性颗粒所受的主要作用力有磁场力 F_{ij}^m , 范德华力 F_{ij}^{vdW} , 碰撞产生的排斥力 F^r 与基体阻力 F_i^h .通常采用点偶极子模型来处理 F_{ij}^m ^[30].以常见的球形磁性颗粒为例,颗粒 i 受到颗粒 j 的磁场力为

$$\begin{aligned} F_{ij}^m = \frac{3\mu_0}{4\pi r_{ij}^4} & \left[(-\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j + 5\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{t} \mathbf{m}_j \cdot \mathbf{t}) \mathbf{t} \right. \\ & \left. - (\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{t}) \mathbf{m}_j - (\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{t}) \mathbf{m}_i \right], \end{aligned} \quad (7)$$

其中, r_{ij} 为颗粒间距, \mathbf{t} 表示从颗粒 i 质心指向颗粒 j 质心的单位矢量, \mathbf{m}_i 和 \mathbf{m}_j 为颗粒磁矩,基体的磁导率近似为真空磁导率 μ_0 .对于高浓度磁性液体,颗粒间平均距离较小时,点偶极子模型误差增大,Keaveny和Maxey^[31]以及Ly等人^[32]分别发展了修正偶极子模型和多偶极子模型,而棒状、核壳等特殊形状的磁性颗粒可视为点偶极子的叠加. Parsegian^[33]指出,两个球形颗粒间的范德华力为

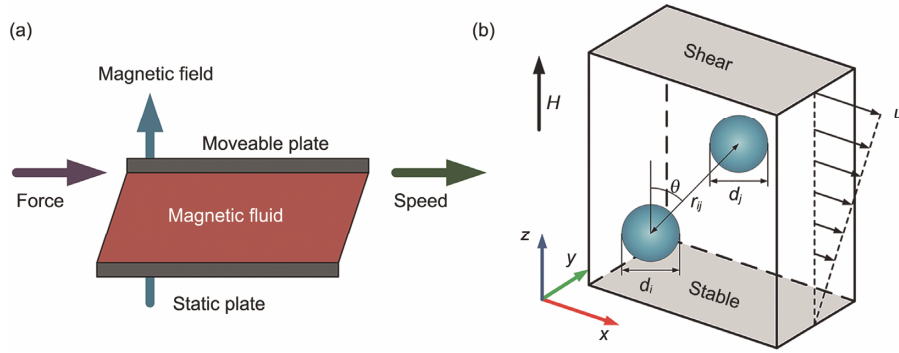


图1 (网络版彩色)磁性液体剪切模式示意图. (a) 宏观示意图^[13]; (b) 细观示意图^[20]

Figure 1 (Color online) Schematic diagram of magnetic fluid under shear mode. (a) From macroscopic view^[13]; (b) from mesoscopic view^[20]

$$\mathbf{F}_{ij}^{\text{vdW}} = \frac{8A}{3} L_{ij} d_i d_j \left[\frac{1}{4L_{ij}^2 - (d_i + d_j)^2} - \frac{1}{4L_{ij}^2 - (d_i - d_j)^2} \right] \mathbf{t}, \quad (8)$$

其中, A 为Hamaker常数, 与磁性颗粒和基体的材料有关. Klingenberg等人^[34]提出, 为了避免范德华力趋于无穷大, 取 $L_{ij} = \max[r_{ij}, d_{ij} + h_{\min}]$, h_{\min} 通常设为 $0.001d_{ij}$. 在分析颗粒间的、颗粒与壁面的挤压和碰撞时, 为了减少计算量、保证精度, 通常假设磁性颗粒为刚体, 用排斥力(式(9)~(10))来代替颗粒变形. Vicente和Ramírez^[35]引入了颗粒间的指数排斥力:

$$\mathbf{F}_{ij}^r = - \left(\xi \frac{3\mu_0 m_{si} m_{sj}}{4\pi d_{ij}^4} + F_{ij}^{\text{vdW}} \right) e^{-\beta \left(\frac{r_{ij}}{d_{ij}} - 1 \right)} \mathbf{t}, \quad (9)$$

其中, m_{si} , m_{sj} 是颗粒的饱和磁化强度, 这一排斥力在无外磁场时仍起作用. ξ 和 β 是人为设定的常数. 颗粒与壁面的排斥力为^[36]

$$\mathbf{F}_i^r = \xi \frac{3\mu_0 m_{si}^2}{4\pi d_i^4} e^{-\beta \left(\frac{h_i}{d_i} - \frac{1}{2} \right)} \mathbf{n}_{\text{wall}}, \quad (10)$$

其中, h_i 为颗粒中心与壁面的距离, \mathbf{n}_{wall} 是壁面指向磁性液体的单位法向量. 颗粒受到的流体阻力满足Stokes阻力公式:

$$\mathbf{F}_i^h = -3\pi\eta_c d_i (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}_i), \quad (11)$$

其中, η_c 为基体黏度, $\mathbf{v}_i - \mathbf{u}_i$ 是相对速度, 来流速度 $\mathbf{u}_i = \gamma z_i \mathbf{e}_x$. 考虑上述作用力, 可列出磁性颗粒的牛顿运动方程组:

$$\sum_{i=1}^{N-1} \left[\sum_{j=i+1}^N (\mathbf{F}_{ij}^m + \mathbf{F}_{ij}^{\text{vdW}} + \mathbf{F}_{ij}^r) + \mathbf{F}_i^h + \mathbf{F}_i^r \right] = m_{pi} \mathbf{a}_i, \quad (12)$$

其中, m_{pi} 为颗粒 i 的质量. 联立式(7)~(12)可以得到全部颗粒在任意时刻的位置、速度、加速度信息. 对足

够多的颗粒求统计平均, 可以得到应力张量等宏观物理量^[13]:

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{V} \sum_i \left[\sum_{j>i} \mathbf{r}_{ij} \mathbf{F}_{ij} - m_{pi} (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}_i) (\mathbf{v}_i - \mathbf{u}_i) \right], \quad (13)$$

其中, V 是磁性液体的体积, \mathbf{F}_{ij} 为颗粒间相互作用的合力. 这一模型(式(7)~(13))也可推广至挤压模式和阀模式, 目前已广泛应用在磁性液体数值模拟中.

1.2 挤压模式下的力学模型

挤压模式下, 磁性液体承受两平行平板间的挤压, 如图2(a)所示^[37]. 样品体积为 V , 初始平板间距为 h_0 , 瞬时挤压速度为 v , 样品被挤压后的厚度为 h , 主要关注上下平板的法向力 F - h 关系. 流动的雷诺数可以定义为^[38]

$$Re = \frac{h_0 v \rho}{\eta}, \quad (14)$$

其中 ρ 和 η 分别是磁性液体的密度和黏度. 通常挤压雷诺数 $Re \approx 10^{-3} \ll 1$, 可采用Stokes流动和润滑理论极大简化分析过程. 对于牛顿流体, 可用等体积、圆截面、无滑移边界条件下挤压法向力的理论解, 即Stefan公式^[39]:

$$F = \frac{3\eta v V^2}{2\pi h^5}. \quad (15)$$

对于具有屈服应力的塑性流体, 假设受到两平行圆板的挤压, 可定义塑性数 S 为^[40]

$$S = \frac{\eta_p v R}{h^2 \tau_y}, \quad (16)$$

其中, R 为样品半径. 低塑性数下, 挤压阻力主要来源于屈服应力; 高塑性数下, 挤压阻力主要是黏度的贡献. 上述理论分析只适用于 $S < 0.05$ 和 $S > 10$ 的情况, 中

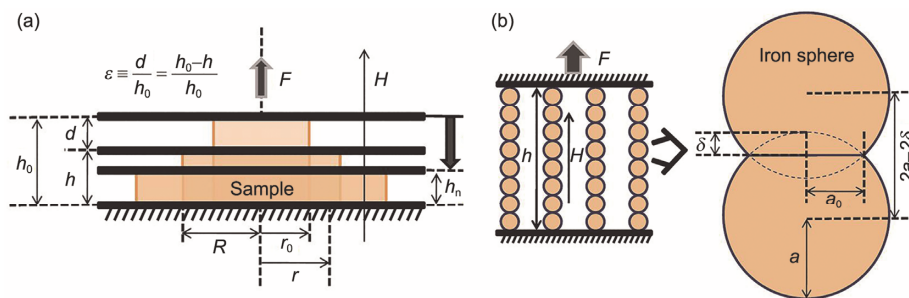


图2 (网络版彩色)磁性液体挤压模式示意图. (a) 宏观示意图^[37]; (b) 细观示意图^[37]
 Figure 2 (Color online) Schematic diagram of magnetic fluid under squeeze mode. (a) From macroscopic view^[37]; (b) from mesoscopic view^[37]

等塑性数下需要采用数值模拟. Covey和Stanmore^[40]根据不可压缩流体的柯西运动方程求出了法向力 F 和挤压速度 v 之间的关系:

$$F = \frac{2\pi\tau_y R^3}{3h} + \frac{4\pi}{7h^2} \sqrt{2\tau_y \eta v R^7}, \quad (17)$$

其中样品体积 $V = \pi R^2 h = \text{常数}$. Williams等人^[41]采用双黏度模型, 发展了适用于磁性液体的挤压流动理论. 作用在上下平板的法向力可以表示为

$$F = \frac{2\pi\tau_y R^3}{h\chi^3} \left[\frac{\gamma^3}{108} + \int_{\gamma/3}^{\chi} S^2 G dS \right], \quad (18)$$

其中, χ , γ , S 和 G 4个参数分别定义为

$$\gamma = \frac{\eta}{\eta_0}, \quad S = \frac{\eta v r}{h^2 \tau_y}, \quad \chi = S(r=R), \quad G = -\frac{h}{2\tau_y} \frac{dp}{dr}, \quad (19)$$

其中, η_0 是式(4)中屈服前的黏度. 当塑性数 S 很小时, 压强梯度 G 以及黏度对法向力的贡献可以忽略, 式(17)可以简化为

$$F = \frac{2\pi\tau_y R^3}{3h}. \quad (20)$$

式(13)与通过Bingham模型推导出的式(12)在低塑性数下的极限相一致. 综上, 从宏观角度出发, Bingham流体和双黏度流体等体积挤压时, 法向力与 $h^{-5/2}$ 成正比.

上述模型将磁性液体视为各向同性材料. 实际上磁性液体是一种由颗粒和连续介质基体组成的两相流. 1997年, Yang^[42]从细观角度提出了适用于高浓度磁性液体的挤压模型. 假设磁性颗粒在外磁场下聚合成 z 方向的链状结构, 挤压后相邻颗粒之间、颗粒与上下板之间发生均匀压缩变形, 如图2(b)所示^[37]. 颗粒主要受挤压力 f 、磁场力 f^m 作用, 上下平板的法向力主要是颗粒挤压力的贡献:

$$F = N_c f, \quad (21)$$

其中, N_c 为颗粒链数. 假设磁性颗粒是纯弹性材料, 根据Hertz接触理论, 挤压面的半径为

$$a_0^3 = \frac{3a}{4} \frac{1-\nu^2}{E} (f + f^m), \quad (22)$$

其中, ν 和 E 分别为颗粒的泊松比和杨氏模量. 通过 a_0 得到压痕深度与颗粒间距, 采用点偶极子模型(式(7))求出 f^m , 最终可以得到:

$$F = \frac{3}{2} \frac{\phi V f_0 H^2}{\pi h} \left[\frac{4E}{3f_0 H^2 (1-\nu^2)} \left(\frac{\delta}{a}\right)^{3/2} \left(1 - \frac{\delta}{a}\right) - \left(1 - \frac{\delta}{a}\right)^{-3} \right]. \quad (23)$$

从微观角度得出的挤压法向力是压痕深度的非线性函数, 与 h 成反比, 近似与颗粒的杨氏模量成正比. 此外, Ruiz-López等人^[43]还研究了低浓度磁性液体的细观挤压模型. 其中, 磁性颗粒可以自由运动, 受力情况与剪切模式类似, 上下平板的法向力主要是颗粒间磁场力的贡献. Engmann等人^[38]得出, 挤压过程中磁性液体内部某处的基体流速为

$$u_i = \frac{3v}{4} \frac{r}{h} \left(1 - \frac{4z}{h^2}\right) \hat{r} + \frac{v}{2} \frac{z}{h} \left(3 - \frac{4z^2}{h^2}\right) \hat{z}, \quad (24)$$

其中, \hat{r} 和 \hat{z} 为柱坐标单位向量. 采用类似剪切模式细观模型的分析方法, 结合式(7)~(13)与式(24)可求出磁性液体的内部结构与挤压法向力.

1.3 阀模式下的力学模型

阀模式下, 磁性液体处于Poiseuille流动状态, 如图3(a)所示^[13], 重点关注剪切率与壁面剪应力 τ_w 或压强梯度 ∇P 的关系. Bossis等人^[44]用理论和实验的手段研究了圆管中Bingham流体的Poiseuille流动, 得到了管道内的平均剪切率和 τ_w 的关系:

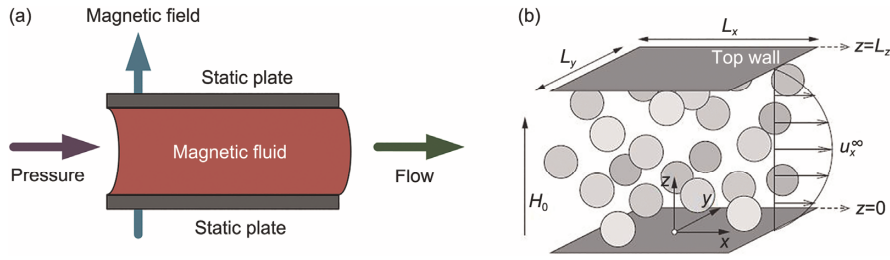


图3 (网络版彩色)磁性液体阀模式示意图. (a) 宏观示意图^[13]; (b) 细观示意图^[36]

Figure 3 (Color online) Schematic diagram of magnetic fluid under valve mode. (a) From macroscopic view^[13]; (b) from mesoscopic view^[36]

$$\dot{\gamma} = \frac{\tau_w}{4\eta_{app}} \left[1 - \frac{4\tau_y}{3\tau_w} + \frac{1}{3} \left(\frac{\tau_y}{\tau_w} \right)^4 \right]. \quad (25)$$

当压力梯度足够大时, $\eta_{app} \rightarrow \eta_p$, $\tau_w \gg \tau_y$, 上式简化为

$$\dot{\gamma} = \left(\tau_w - \frac{4}{3}\tau_y \right) / 4\eta_p. \quad (26)$$

剪切力足够大时, 平均剪切率近似与 τ_w 成线性关系.

阀模式下, 颗粒间磁场力仍主导着磁性液体的流动, Pappas和Klingenberg^[36]发展了磁性液体阀模式下的细观力学模型. 假设磁性液体在两无限大平行平板间做Poiseuille流动, 如图3(b)所示^[36]. 颗粒受力情况与剪切模式类似, 不同点在于阀模式下的来流速度. Tamura等人^[45]求解了关于来流速度的Stokes方程:

$$\eta_c \nabla^2 u(r) = \nabla P - f_{bulk}(r), \quad (27)$$

其中, $f_{bulk}(r)$ 是任意一点的体积力密度, 由作用在每个颗粒上的全部非流体力学力组成. 通过上式可以求出来流速度的分量与 x, y, z 坐标的关系: $u_y = u_z = 0$ 以及

$$u_x(z) = -\frac{\tau_w}{\eta_c L_z} (z - L_z) + \frac{1}{\eta_c L_x L_y} \sum_i F_{i,x}^{nhyd} \left[\left(1 - \frac{z_i}{L_z} \right) z - (z - z_i) H(z - z_i) \right], \quad (28)$$

其中, $\tau_w = -(dP/dx)L_z/2$ 是壁面处的剪应力, $H(z)$ 是Heaviside阶跃函数, $F_{i,x}^{nhyd}$ 是第 i 个颗粒所受非流体力学力的 x 分量, z_i 是第 i 个颗粒的 z 坐标. 来流速度仅是 z 的函数, 但与压强梯度、颗粒分布、颗粒间相互作用均有关. 联立式(7)~(13)与式(27), 求解牛顿运动方程组, 可得到磁性液体的剪切率以及内部剪应力.

综上, 国内外课题组针对磁性液体3种工作模式下的力学模型开展了大量研究, 取得了丰硕成果, 为数值模拟的发展提供了强有力的支撑.

2 模拟方法

随着计算机硬件的发展, 数值求解磁性液体力

学模型成为可能. 国内外科研人员提出了诸多模拟方法, 或改进现有的数值模拟方法, 使其适用于磁性液体.

2.1 分子动力学模拟

1957年, 加州大学辐射实验室开创了用分子动力学模拟研究物质宏观性质的先例. 此后研究人员对其进行了诸多改进^[46,47], 以研究多种材料体系. 分子动力学假设(1) 所有颗粒都遵循经典的牛顿运动规律, (2) 粒子间的相互作用满足叠加原理. 在绝热近似和忽略量子效应时, 这些假设是可行的. 分子动力学的基本思想是通过粒子间的相互作用势, 求出每个粒子所受的力. 例如通过Lennard-Jones势函数得到粒子间的保守力为^[47]

$$U_{ij} = 4\epsilon \left[\left(\frac{d}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (29)$$

$$F_{ij}^C = -24\epsilon \left[2 \left(\frac{d}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{d}{r_{ij}} \right)^6 \right] \frac{\mathbf{t}}{r_{ij}}. \quad (30)$$

在研究磁性液体时, 通常将基体粗粒化, 将磁性颗粒和基体分别视为大小颗粒(如图4(a)所示)^[48], 大颗粒受磁场力(式(7))、排斥力(式(9)~(10))作用. 小颗粒受保守力(式(29))、耗散力、随机力作用:

$$\mathbf{F}_{ij}^D = -F_0 \omega_D(r_{ij}) (\mathbf{e}_{ij} \cdot \mathbf{v}_{ij}) \mathbf{e}_{ij}, \quad (31)$$

$$\mathbf{F}_{ij}^R = F'_0 \omega_R(r_{ij}) \theta_{ij} \mathbf{e}_{ij}, \quad (32)$$

其中, F_0, F'_0 为常数, $\omega_D(r_{ij}), \omega_R(r_{ij})$ 为距离相关的权函数, θ_{ij} 为白噪声. 大、小颗粒之间受保守力作用. 在给定的初始条件、边界条件下, 对一定数目的粒子建立牛顿运动方程组:

$$\sum \mathbf{F} = m_p \mathbf{a}_i. \quad (33)$$

采用数值方法求得这些粒子的运动轨迹和运动速度^[13]. 对于平衡系统, 对足够大的尺度求统计平均

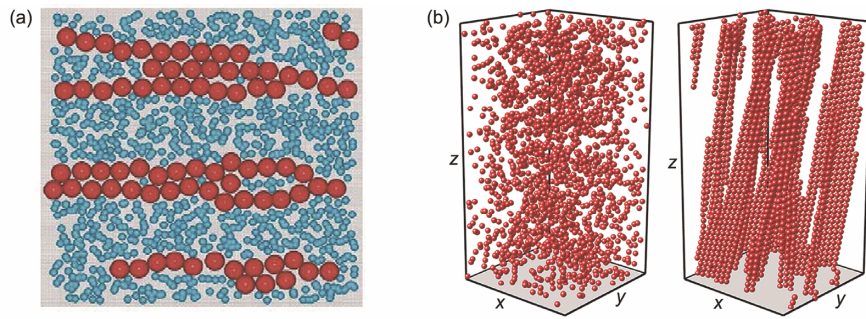


图4 (网络版彩色)磁性液体数值模拟得出的典型内部结构. (a) 分子动力学模拟, 其中小颗粒代表基体^[48]; (b) 颗粒动力学模拟^[20]
Figure 4 (Color online) Typical microstructures of magnetic fluid obtained from simulations. (a) Molecular dynamics simulation, small spheres represent the matrix^[48]; (b) particle-level dynamic simulation^[20]

(式(13)), 可以得到所需的宏观物理量和力学量. 分子动力学适用于微观到细观尺度问题, 可像实验一样实时观察, 许多实验中难以获得的微观细节, 在模拟中都可以方便地观察到, 这一优点使其成为机理研究的有效手段. Liu^[14]首先提出了针对磁性液体的分子动力学模拟方法. Li等人^[49]采用分子动力学研究了纳米颗粒磁性液体的三维内部结构与磁矩分布. 该课题组还用同样算法模拟了铁磁颗粒的径向分布函数等结构参数^[50]. 然而, 分子动力学模拟的时间尺度和空间尺度分别为 10^{-9} s和 10^{-9} m量级, 远小于实验的时空尺度, 且粗粒化近似会带来误差. 分子动力学模拟还具有计算量大、只能求解简单边界条件的缺点.

2.2 颗粒动力学模拟

颗粒动力学是一种从颗粒出发的细观模拟方法. 该方法将基体视为连续介质, 直接套用磁性液体3种工作模式下的细观力学模型, 仍采用牛顿运动方程组求解颗粒的运动, 最后统计平均出宏观物理量^[51]. 颗粒动力学模拟的典型结果如图4(b)所示^[20]. 对于微米级磁性颗粒, 颗粒布朗运动的随机力远小于磁场力, 可以忽略. 当颗粒直径 $D \approx 10$ nm 时, 可忽略颗粒惯性, 但需考虑布朗运动, 此时颗粒动力学模拟又称为布朗动力学模拟^[52]:

$$F_i^B = \sqrt{\frac{6\pi k_B T \eta d_i}{\delta t}} \mathbf{R}, \quad (34)$$

其中, k_B 为玻尔兹曼常数, T 是绝对温度, δt 是布朗力的时间步长, \mathbf{R} 为均值为零的随机单位向量. Michaelides^[52]指出, 这一随机力长时间的贡献与 δt 的选取无关. 颗粒动力学模拟的时间尺度为 $10^{-3} \sim 10^2$ s量级,

与实验一致, 可揭示磁流变效应的细观机理. 该方法模型简单直观, 是目前最常用的数值模拟方法, 但同样具有计算量大、只适用于简单边界条件的缺点. Liu等人^[53]采用颗粒动力学模拟了多分散磁流变液在静态、剪切和挤压模式下的内部结构以及剪切模式下的屈服应力和剪应力, 指出磁流变液的力学性能与内部结构演化密切相关. Gong等人^[54]模拟了预结构化、稳态剪切和动态剪切下磁性液体的内部结构演化, 得到的法向应力能定量描述实验现象.

2.3 计算流体力学模拟

计算流体力学采用离散化方法求解固定几何空间内的流体质量、动量、能量方程及其他方程^[55]:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u}) = 0, \quad (35)$$

$$\frac{\partial (\rho \mathbf{u})}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} \mathbf{u}) = -\nabla p + \nabla \cdot \boldsymbol{\tau} + \mathbf{F}, \quad (36)$$

$$\frac{\partial (\rho T)}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \mathbf{u} T) = \nabla \cdot \left(\frac{k}{c_p} \nabla T \right) + S_T, \quad (37)$$

其中, $\boldsymbol{\tau}$ 为流体微元表面应力, \mathbf{F} 为体积力, k 为流体传热系数, c_p 为比热容, S_T 为黏性耗散项.

确定初始条件、边界条件, 将计算区域划分为若干网格, 求得式(34)~(36)在有限个离散点上的数值解, 采用差值可以得到磁性液体中任意一点的速度、压强、应力等物理量, 如图5(a)所示^[56]. 最后通过验证和确认, 证实模拟的准确性^[58]. 对于宏观尺度的问题, 通常将磁性液体视为一种非牛顿流体, 忽略颗粒间的细观物理现象; 对于细观尺度的问题, 通常将磁性液体的流动视为流固耦合问题. CFD方法善于处理复杂边界条件, 精度高, 已成为分析和解决实际问

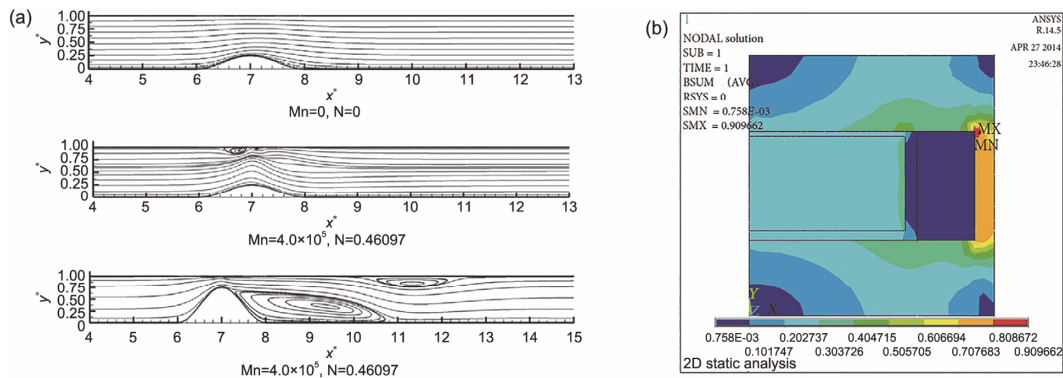


图5 (网络版彩色)磁性液体数值模拟的典型结果。(a) CFD模拟得到的流线图^[56]; (b) 有限元模拟得到的磁流变液阻尼器内磁场分布^[57]

Figure 5 (Color online) Typical results of simulations of magnetic fluid. (a) Streamlines obtained from CFD simulations^[56]; (b) magnetic field distribution in a MR damper obtained from FEM approach^[57]

题、指导器件设计的强有力工具^[59]。然而,采用非牛顿流观点时,CFD模拟需要已知磁性液体的本构方程,对差值格式要求较高;采用流固耦合观点时,CFD模拟内存开销大,无法模拟大量颗粒。Lacis和Gosko^[60]采用直接数值模拟研究了磁流变液中磁性颗粒的运动,提高了模型中流体力学相互作用的精度。Han等人^[61]模拟了磁性液体的颗粒成链过程与磁流变效应。指出,成链过程由颗粒体积分数主导,磁场力模型的选取对稳态剪切下的模拟精度有重要影响。Gurubasavaraju等人^[62]采用CFD方法模拟了磁流变液阻尼器在不同电流、不同频率下的响应,计算与实验相符。特别地,He等人^[63]采用CFD方法研究不同形状、不同质量分数的颗粒的流动阻力系数,为颗粒动力学模拟提供理论基础。

2.4 有限元模拟

有限元方法从变分原理出发,假设未知场函数满足如下平衡方程和边界条件:

$$\mathbf{A}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (\text{在 } \Omega \text{ 内}), \quad (38)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{u}) = \mathbf{0} \quad (\text{在 } \Gamma \text{ 上}). \quad (39)$$

将整个求解域划分为若干连通单元,取近似解为单元节点处未知场函数的插值函数^[64]:

$$\tilde{\mathbf{u}} = \sum_{i=1}^n N_i \mathbf{a}_i = \mathbf{N} \mathbf{a}, \quad (40)$$

其中, \mathbf{a}_i 为待定参数, N_i 是称之为形函数的已知函数。强迫余量在某种平均意义上等于0时,可得到节点处未知场函数的值,进而得到问题的解^[64]。

$$\int_{\Omega} \mathbf{W}_j^T \mathbf{A}(\mathbf{N} \mathbf{a}) d\Omega + \int_{\Gamma} \bar{\mathbf{W}}_j^T \mathbf{B}(\mathbf{N} \mathbf{a}) d\Gamma = \mathbf{0}, \quad (41)$$

其中, \mathbf{W}_j 和 $\bar{\mathbf{W}}_j$ 称为权函数。有限元法计算量小,能适应复杂边界,可研究细观到宏观尺度的问题,与CFD模拟类似,FEM模拟也可分为非牛顿流观点和流固耦合观点。采用非牛顿流观点时,有限元无法反映细观现象;采用流固耦合观点时,有限元无法模拟大量颗粒。在磁性液体研究中,有限元方法通常不直接模拟力学性能,而是得出磁场分布等信息,为理论分析或器件设计提供依据,如图5(b)所示^[57]。Gong等人^[57]通过有限元法研究了磁流变液阻尼器内部的磁场分布,据此对阻尼器的力-位移曲线进行了建模。Warnke^[65]使用商用有限元软件模拟了磁性颗粒在基体中的分散性,指出颗粒浓度与基体流动主导了分散过程。这一方法可以用于不同磁场环境、不同容器形状下的磁性颗粒分散过程研究。Patel和Chhabra^[66]用有限元法模拟了椭球颗粒在塑性流体基体中的相对运动,求得的阻力系数对于颗粒动力学模拟的发展有重要意义。

2.5 Monte Carlo法

Monte Carlo法是一种将概率现象作为研究对象的数值模拟方法,通过构造一个和所研究的系统性能近似的概率模型,对模型或过程进行观察或随机试验,通过随机试验的统计值来推定系统特性。假设磁性颗粒初始随机分布,每一时间步令颗粒或颗粒链随机运动,系统总能量 U 包括磁势能 U_{ij}^m , U_i^h , 范德华相互作用能 U_{ij}^{vdW} , 排斥力势能 U_{ij}^r :

$$U_{ij}^m = \frac{\mu_0}{4\pi r_{ij}^3} \left[\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{m}_j - 3(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{t})(\mathbf{m}_j \cdot \mathbf{t}) \right], \quad (42)$$

$$U_i^h = -\mu_0 m_i \cdot H, \quad (43)$$

$$U_{ij}^{vdw} = -\frac{A}{3} \left[\frac{d_i d_j}{4r_{ij}^2 - (d_i + d_j)^2} + \frac{d_i d_j}{4r_{ij}^2 - (d_i - d_j)^2} + \frac{1}{2} \ln \frac{4r_{ij}^2 - (d_i + d_j)^2}{4r_{ij}^2 - (d_i - d_j)^2} \right], \quad (44)$$

$$U_{ij}^i = U_0 e^{-\beta \left(\frac{r_{ij}}{d_j} - 1 \right)}. \quad (45)$$

如果新构型的系统总能量低于原构型, 则接受新构型, 否则重新进行随机运动. 计算收敛时, 即得到磁性液体的稳态内部结构, 如图6(a)所示^[18]. 这一方法适用于细观尺度问题, 具有模型简单、结果一致性好、适于并行等优点, 常用来研究磁性液体的内部结构演化、颗粒聚合等统计问题. 但Monte Carlo法需要将确定性问题转化为随机问题, 收敛需要较长时间步. Okada和Sato^[18]采用Monte Carlo法研究了磁性液体中棒状铁磁性颗粒在静态下的聚合过程. 颗粒形成粗壮的链状结构, 相邻的两条链反向倾斜, 当磁场增强时, 颗粒链吸收反向倾斜的颗粒结构从而进一步聚合. Ma等人^[67]模拟了距离加权系数对高浓度磁性液体剪应力的影响, 提出了一种考虑距离系数和调整系数的模型, 计算结果和实验结果符合得很好.

2.6 机器学习

机器学习最早由Samuel^[68]于1959年提出, 旨在通过统计学手段, 在没有明确规划的前提下赋予计算机从数据中学习的能力. 随着算法和应用范围的不断发展, 机器学习提供了一种不必了解材料内部机理就可预报材料宏观性能的新工具. 以极端学习

机算法(extreme learning machine)为例, 以磁性液体的剪切率 $\dot{\gamma}$ 和磁感应强度 B 为输入 $\mathbf{x}_i = [\dot{\gamma}, B]^T$, 以剪应力 τ 为输出 $t_i = \tau$. 设输入权向量为 $\mathbf{w}_j = [w_{j1}, w_{j2}]^T$, 输出权向量为 β_j , 阈值 b_j . 采用 L 个隐藏节点, 使用 N 组实验数据进行训练, 当满足式(45)时, 确定 $\mathbf{w}_j, \beta_j, b_j$, 即得到磁性液体的本构模型^[19]:

$$\sum_{j=1}^L \beta_j g(\mathbf{w}_j, b_j, \mathbf{x}_i) = t_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (46)$$

Bahiuddin等人^[19]采用单隐层的前馈神经网络, 模拟了磁性液体剪切模式下的力学性能. 仅已知剪应力与剪切率、磁感应强度有依赖关系, 机器学习得出的本构模型可以预报未知磁场下的流动曲线, 如图6(b)所示. Zeinali等人^[69]采用自适应模糊神经网络, 预报了商用短行程和长行程磁性液体阻尼器的力学性能, 回归值分别达到0.9989和0.9961. Zhao等人^[70]将宏观尺度的CFD模拟、细观尺度的MD模拟以及主动机器学习相结合, 研究了非牛顿流体的圆柱绕流问题. CFD求解器为MD模拟提供初始条件, 同时MD模拟给出了CFD所必须的本构关系, 利用主动学习压缩计算量, 最终建立了聚合物流动的多尺度模型. 机器学习在其中起到的作用有一定普适性, 该技术对磁性液体的模拟研究有重要借鉴意义. 机器学习可以得出磁性液体及器件的唯像本构模型, 理论上适用于任何问题, 有广泛的应用前景. 然而以神经网络为代表的“黑盒子”型机器学习无法给出本构模型的显式表达式. 基于进化算法(evolutionary algorithm)的机器学习可以得到显示表达式^[71], 但其形式会因具体问题而异, 本构模型不具有普适性. 各种模拟方法的适用范围及优缺点如表1所示.

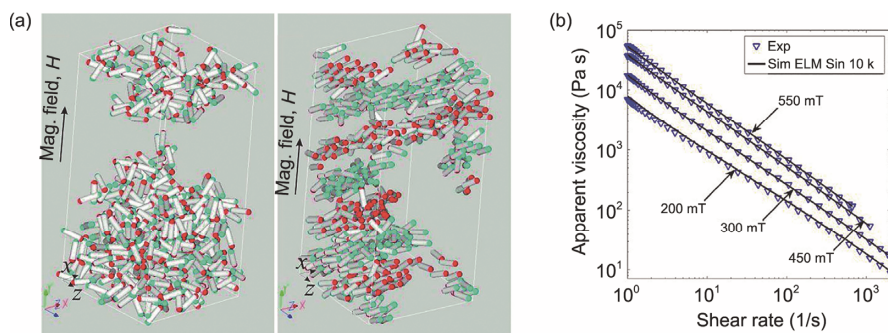


图6 (网络版彩色)磁性液体数值模拟的典型结果. (a) Monte Carlo模拟的内部结构图^[18]; (b) 机器学习模拟的流动曲线^[19]

Figure 6 (Color online) Typical results of simulations of magnetic fluid. (a) Microstructures obtained from Monte Carlo simulation^[18]; (b) flow curves obtained from machine learning simulation^[19]

表1 磁性液体常用数值模拟方法的适用范围及优缺点

Table 1 The scope of application, advantage, and disadvantage of conventional simulation methods of magnetic fluid

模拟方法	空间尺度	边界条件	优点	缺点
分子动力学	微观-细观	简单	可观察微观细节	计算量大, 时间尺度小
颗粒动力学	细观	简单	恰当的时间尺度	计算量大
计算流体力学	细观-宏观	复杂	精度高	差值格式要求高, 内存开销大
有限元法	细观-宏观	复杂	计算量小	通常不直接模拟力学性能
Monte Carlo法	细观	简单	模型简单	需要构造随机问题, 需要较多时间步
机器学习	宏观	复杂	适用于任何问题	无法给出显式表达式, 结果不具有普适性

3 磁性液体的力学性能模拟研究

近年来, 提高磁流变效应和改善沉降问题成为了磁性液体研究领域的两大挑战, 研究人员首先从颗粒角度出发, 制备不同形状、微结构的新型颗粒. 已有结果表明, 棒状、片状颗粒具有优异的磁流变效应^[72,73]; 核壳、空心等微结构可以同时提高磁流变效应并降低颗粒密度^[74,75]. 一些新型的材料体系, 例如双分散、顺反磁性颗粒也可提升磁性液体的磁流变性能. 为了研究磁性液体的磁流变效应增强机理以及复杂力学行为中的内部结构演化, 国内外课题组开展了广泛的模拟研究. 与此同时, 研究者针对生物磁流体的力、电、磁耦合现象, 结合医学应用背景, 也开展了大量模拟工作.

3.1 新型磁性液体的力学性能模拟

Staoh^[76]在布朗动力学模拟中引入了旋转布朗运动, 研究了棒状 Fe_2O_3 颗粒磁性液体的内部结构与颗粒纵横比、外磁场强度、质量分数、剪切率的关系, 拓展了颗粒动力学模拟的研究对象范围. 研究表明, 棒状颗粒在外磁场下形成“筏”状聚合结构, 布朗运动对大纵横比颗粒的聚合有显著影响. 增大外磁场会促进“筏”状结构的形成, 剪切流动仅影响内部结构的尺寸, 体积分数对“筏”状结构的生长有显著影响. Wu等人^[77]将实验与颗粒动力学模拟相结合, 研究了 Fe_3O_4 纳米颗粒的粒径对磁流变效应的影响. 研究表明, 颗粒直径变化产生的内部结构差异导致了粒径越大, 磁流变效应越强. Pei等人^[78]引入等效磁矩, 模拟了 $\text{SiO}_2@ \text{Fe}_3\text{O}_4$ 核壳颗粒的磁流变效应增强机理. 其中, SiO_2 核心起到了固连磁性材料的作用, 使得磁性颗粒聚合成更大尺度的内部结构, 更好地抵抗流动和布朗运动的破坏, 计算与实验相一致. Ruan等人^[79]通过颗粒动力学模拟发现, 相同质量分数下,

较大的空心颗粒磁性液体相比于较小的二级纳米颗粒有更优越的力学性能和更强的沉降稳定性. 模拟表明, 空心结构增大了磁性材料间的接触面积, 增强了颗粒之间的磁场力, 颗粒聚合成的内部结构能抵抗更强的剪切流动, 因而表现出更大的剪应力. 计算与实验相结合, 揭示了磁性颗粒中空微结构的剪应力增强机理. Gong课题组^[20]采用颗粒动力学进一步模拟了粒径、壁厚、质量分数对空心 Fe_3O_4 磁流变液剪应力的影响, 如图7(a)~(c)所示. 通过改进颗粒间作用力公式, 采用割补法处理空心结构, 进一步提高了模拟精度. 对于低浓度磁流变液(20 wt%), 最佳直径为1000 nm, 最佳壁厚为 $H=0.39D$; 对于高浓度磁流变液(40 wt%), 最佳直径为100 nm, 最佳壁厚为 $H=0.35D$. 剪应力的变化是磁场力强弱、周边颗粒数、颗粒链的紧凑程度和取向四个因素相互竞争的结果. 该研究给出了最佳空心结构参数, 为颗粒制备提供了指导. Liu等人^[80]采用颗粒动力学方法, 首次模拟了顺-反磁颗粒磁性液体的力学性能, 如图7(d)所示. 结果表明, 颗粒体积分数大于12.5%, 顺磁颗粒体积比约为50%时, 颗粒聚合成网状结构, 磁致正应力相比于单一颗粒有最佳的增强效应. 该研究揭示了实验中难以观察到的内部结构, 利用新型材料体系中的新结构、新现象, 可进一步拓展磁性液体的应用范围.

3.2 传统磁性液体复杂力学行为的数值模拟

对于传统的羰基铁粉、 Fe_3O_4 磁性液体, 数值模拟广泛应用于蠕变、松弛、沉降、颗粒聚合、法向挤压等复杂力学行为的研究. Wang等人^[81]采用布朗动力学模拟了磁性液体在施加恒定剪应力 τ_0 时的蠕变回复行为. 通常颗粒动力学模拟需要已知剪切率, 该研究根据当前时刻的颗粒排布求得剪应力, 进而利用基体黏度 η_s 反推下一时刻的剪切率:

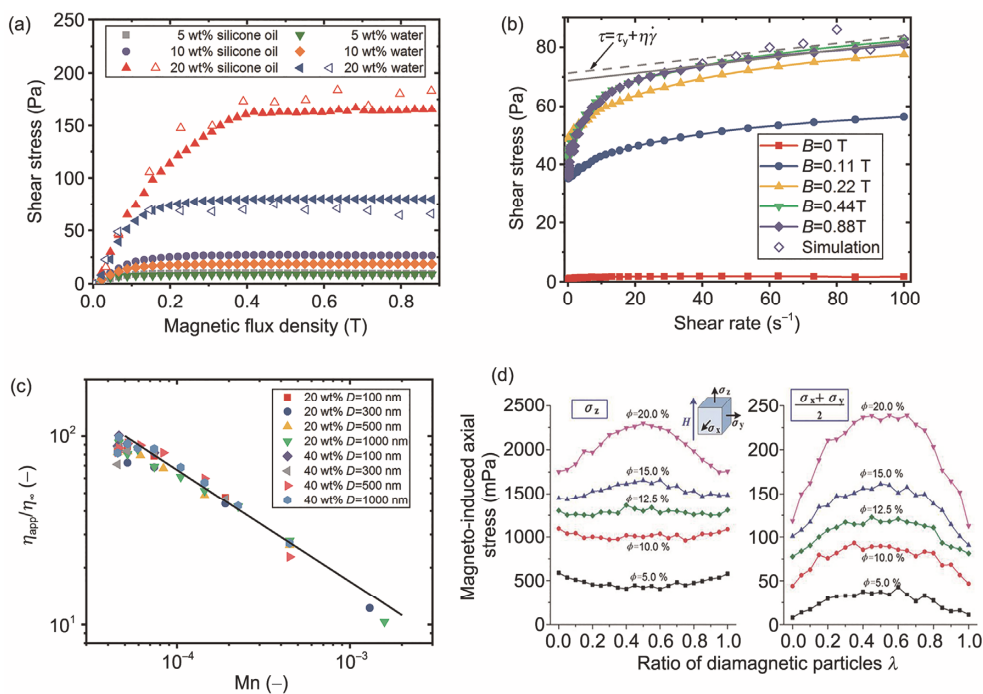


图7 (网络版彩色)新型磁性液体的力学性能模拟结果. (a) 空心 Fe_3O_4 磁流变液的剪应力-磁感应强度曲线^[20]; (b) 流动曲线^[20]; (c) 粒径、壁厚、质量分数对空心 Fe_3O_4 磁流变液表观黏度的影响^[20]; (d) 体积分数、反磁颗粒比例对顺-反磁颗粒磁性液体正应力的影响^[80]

Figure 7 (Color online) Simulation results of mechanical properties of novel magnetic fluid. (a) Shear stress versus magnetic flux density curves of hollow Fe_3O_4 MR fluid^[20]; (b) flow curves^[20]; (c) influences of particle diameter, wall thickness, and weight fraction on the apparent viscosity of hollow Fe_3O_4 MR fluid^[20]; (d) the magneto-induced normal stress of magnetic fluid with different volume fractions and ratios of diamagnetic particles^[80]

$$\dot{\gamma}(t) = [\tau_0 - \tau(t)] / \eta_s. \quad (47)$$

研究发现, 不同质量分数下, 蠕变曲线均可分为3个区间: 初始响应区间、阻滞区间和稳态蠕变区间. 长时间的蠕变曲线与稳态剪切类似. 磁性液体的回复行为依赖于应力水平. 应力在分叉点以下时, 磁性液体可回复部分应变; 分叉点以上, 回复的应变可忽略不计. Son^[82]基于离散单元法提出了一套考虑表面活性剂的磁性液体沉降性的模拟方法, 如图8(a)所示. 加入表面活性剂后, 基体黏度、颗粒直径和质量将发生改变. 由表面活性剂产生的颗粒间接触力可由弹簧模型表征. 通过修正Stokes阻力公式, 模拟出的沉降速度与实验观测相一致. 此项研究首次在磁性液体数值模拟中考虑了表面活性剂的作用. Segovia-Gutierrez等人^[84]采用布朗动力学研究了多分散磁性液体稳态剪切和动态剪切下的力学性能. 定义无量纲黏度为

$$\frac{\eta - \eta_s}{\eta_{H=0} - \eta_s}. \quad (48)$$

对于单分散和多分散颗粒, 无量纲黏度-磁感应强度曲线收敛到同一条主曲线上, 磁场较强时, 相对

磁流变效应与磁场强度的平方成正比. Ruiz-López等人^[85]将实验与模拟相结合, 研究了多分散磁流变液在剪切模式下的屈服应力. 定义多分散指数为

$$\text{PDI} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sqrt{(d_i - \bar{d})^2}. \quad (49)$$

多分散指数增大导致链状结构内的颗粒数减少但堆积密度增加, 前者削弱屈服应力但后者会增强颗粒结构, 最终使得屈服应力与分散性基本无关. Shahrivar等人^[15]采用颗粒动力学模拟了羰基铁粉磁流变液在槽道内的二维聚合过程. 定义加权平均的颗粒链尺寸 $S(t)$ 为

$$S(t) = \frac{\sum_s s^2 n_s(t)}{\sum_s s n_s(t)}, \quad (50)$$

其中, $n_s(t)$ 表示长度为 s 个颗粒的颗粒链的数目. 结果表明, $S(t)$ 会经历常数区间与指数增长区间, 模拟出的体积分数-时间曲线与实验相符. Fernández-Toledano等人^[83]采用颗粒动力学研究了粒径分布对屈服应力与颗粒聚合的影响. 粒径呈对数正态分布与舒尔茨分布的颗粒更快地聚集成簇, 但最终颗粒链的尺寸与单分散颗粒无异. 定义连通性 $C(\theta)$ 为

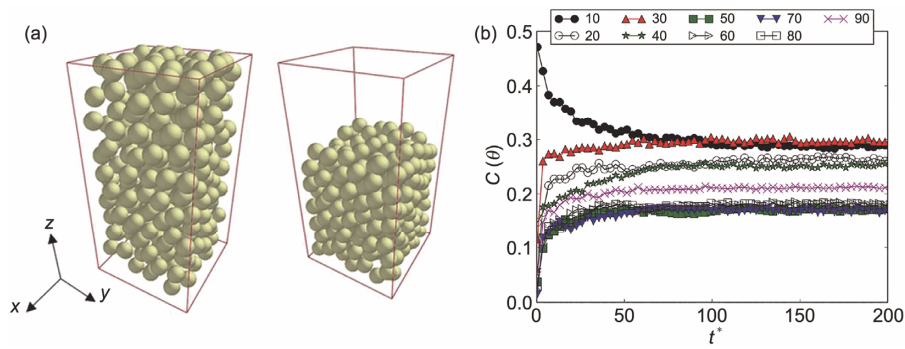


图8 (网络版彩色)传统磁性液体复杂力学行为的数值模拟结果. (a) 磁性液体沉降前后的内部结构图^[82]; (b) 多分散磁性液体连通性随时间的演化^[83]

Figure 8 (Color online) Simulation results of complex mechanical behaviors of conventional magnetic fluid. (a) Microstructures of magnetic fluid before and after settlement^[82]; (b) time-dependent connections between particles for polydisperse magnetic fluid^[83]

取向在 $\theta \sim \theta + d\theta$ 范围内的相互接触的颗粒数:

$$C(\theta) = \frac{N(\theta)}{N-1}, \quad (51)$$

其中, θ 为颗粒质心连线与 z 轴的夹角, 如图8(b)所示. 稳态剪切中, 对于单分散颗粒, 当 $\theta=60^\circ$ 的颗粒结构全部破坏时, 磁性液体开始屈服; 对于多分散颗粒, 当 $\theta=80^\circ$ 的颗粒结构全部破坏时, 磁性液体开始屈服. 动态剪切中, 线性黏弹性区间内, 每种颗粒的堆积密度和连通性基本不变; 应变增大时, 单分散和多分散磁性液体均出现层状结构, 多分散磁性液体的弹性模量下降更快. Ruiz-López等人^[43]还采用颗粒动力学模拟了磁性液体挤压模式下的力学性能. 不同初始颗粒构型下, 挤压屈服应力与体积分数成正比, 与磁场强度的平方成正比; 法向力与样品压缩后的厚度似成反比. 挤压过程中, 初始状态互相分离的链状结构被破坏并合并为短粗结构, 润滑力与摩擦力对法向力也有贡献.

3.3 生物磁流体的数值模拟

自Haik等人^[86]提出生物磁流体力学(biomagnetic fluid dynamics)概念以来, 研究者们就生物磁流体的流动与传热现象开展了广泛的数值模拟研究. Tzirtzilakis^[87]拓展了生物磁流体模型, 引入了弱导电性和能量输运, 为后续研究奠定了理论基础. Türk等人^[88]采用有限元法, 首次模拟了生物磁流体在多种复杂槽道内的流动与温度分布, 如图9(a)所示. 随着外磁场的增强, 由于槽道狭窄而产生的涡的尺度显著增大, 涡流区的温度相对较低. 研究表明, 可以通过施加外磁场使生物磁流体在流经狭窄处后恢复流动,

在生物工程与医学领域有较高的应用价值. 罗小平等人^[12]采用分子动力学, 开创性地研究了生物磁流体在半环形腔内的自然对流、热磁对流现象, 如图9(b)所示. 在非均匀磁场和非等温条件下, 磁热对流形成4个漩涡, 在热壁面附近形成3个热羽流. 随着外磁场的增强, 上部区域漩涡扩大, 下部区域漩涡向下移动, 中间热羽流对流传热增强. 该研究也表明, 分子动力学中的eDPD方法在研究复杂流体的流动与传热问题时有广阔前景. Sharifi等人^[89]采用CFD方法模拟了血液在两个互相垂直的磁铁作用下的槽道流和热传导. 外磁场促使生物磁流体在管壁处生成了两个对称的涡, 可以扩大药物输运中的有效接触面积, 有利于药物吸收. Mousavi等人^[56]的研究表明, 外磁场可以减缓血管收缩段后侧的血栓形成, 也可降低收缩段处的壁面剪应力, 对动脉硬化的研究有重要意义.

4 总结与展望

磁性液体作为一种磁场调控的磁流变智能材料, 已经引起国内外课题组的广泛关注. 针对磁流变机理, 研究人员开展了大量理论与数值模拟研究, 取得了显著成果. 数值模拟已在解释实验现象, 研究微观机理, 预报材料力学性能, 指导颗粒制备和器件设计方面表现出广阔前景, 显示出巨大的应用价值. 然而, 磁性液体数值模拟中还有很多问题亟待解决. 首先, 从微观层面出发的模型大多只考虑颗粒间的主要相互作用. 为了研制磁流变效应高、分散性好且密度与基体匹配的磁性颗粒, 实验中广泛采用包裹、修饰、添加表面活性剂等方法. 非磁性成分对磁流变效

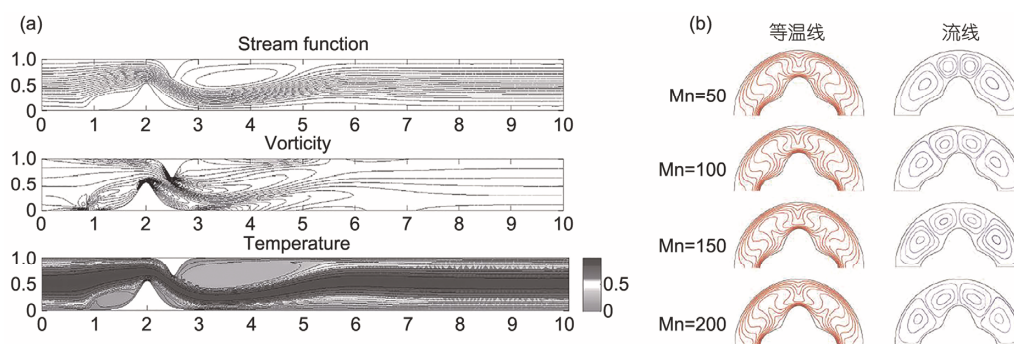


图9 (网络版彩色)生物磁流体的数值模拟结果. (a) 生物磁流体在复杂槽道内的流线、涡量、温度分布^[88]; (b) 不同Mason数下的热磁对流温度场、流场分布^[12]

Figure 9 (Color online) Simulation results of biomagnetic fluid. (a) Streamlines, vorticity contours and isotherms of biomagnetic fluid in a stenosed channel^[88]; (b) isotherms and streamlines of thermomagnetic convection for different Mason numbers^[12]

应的影响还鲜有研究. 建立涵盖多种微观相互作用的精细理论模型, 对磁性液体数值模拟的发展具有重要意义. 其次, 现有的数值模拟方法, 由于计算量的限制, 无法同时反映磁性液体的宏观力学性能和微观物理现象. 流变测试中, 磁性液体样品中的颗粒数高达 10^{12} 个. 有限元与计算流体力学等方法擅长处理复杂边界条件, 模拟实际问题, 但由于网格数的限制, 无法同时得到磁性液体内部结构. 以分子动力学为代表的微观模拟方法可以得到内部结构, 但由于采用周期性边界条件, 无法反映大尺度的颗粒排布, 宏观力学性能与实验结果有一定偏差. 因此, 将不同

数值模拟方法相结合, 建立磁性液体的多尺度模型, 全面表征其在实验或工程器件中的力学性能与内部结构演化, 进一步提高模拟精度, 还存在严峻挑战. 利用机器学习协调不同尺度的数值模拟, 压缩计算量, 已成为一种可行思路. 最后, 虽然磁性液体力学性能和力学行为研究已比较成熟, 但近年来, 磁性液体受磁场调控的电学性能吸引了研究人员的注意, 在电池、传感等方面展现出广阔应用前景, 这方面的机理研究还处于起步阶段. 将力学模型与电、磁学模型相结合, 模拟磁性液体其他物理性能, 发展多物理场耦合的模拟方法, 将是未来的一个重要发展方向.

参考文献

- Li X H. Nano-magnetic Fluid: Preparation, Performance and Application (in Chinese). Beijing: Science Press, 2009. 1-5 [李学慧. 纳米磁性液体: 制备, 性能及其应用. 北京: 科学出版社, 2009. 1-5]
- De Vicente J, Klingenberg D J, Hidalgo-Alvarez R. Magnetorheological fluids: A review. *Soft Matter*, 2011, 7: 3701-3710
- Kim H C, Han C, Kim P, et al. A new measurement method of magnetic flux density using magnetorheological fluid characteristics and a variable resistor circuit. *Smart Mater Struct*, 2015, 24: 087002
- Pineux F, Marega R, Stopin A, et al. Biotechnological promises of Fe-filled CNTs for cell shepherding and magnetic fluid hyperthermia applications. *Nanoscale*, 2015, 7: 20474-20488
- Lee J W, Hong K P, Cho M W, et al. Polishing characteristics of optical glass using PMMA-coated carbonyl-iron-based magnetorheological fluid. *Smart Mater Struct*, 2015, 24: 065002
- Sun S S, Yang J, Li W H, et al. Development of a novel variable stiffness and damping magnetorheological fluid damper. *Smart Mater Struct*, 2015, 24: 085021
- Sun S S, Ning D H, Yang J, et al. Development of an MR seat suspension with self-powered generation capability. *Smart Mater Struct*, 2017, 26: 085025
- Aravind A, Nair R, Raveendran S, et al. Aptamer conjugated paclitaxel and magnetic fluid loaded fluorescently tagged PLGA nanoparticles for targeted cancer therapy. *J Magn Magn Mater*, 2013, 344: 116-123
- Margida A J, Weiss K D, Carlson J D. Magnetorheological materials based on iron alloy particles. *Int J Mod Phys B*, 1996, 10: 3335-3341
- Pu H T, Jiang F J. Towards high sedimentation stability: Magnetorheological fluids based on CNT/Fe₃O₄ nanocomposites. *Nanotechnology*,

- 2005, 16: 1486
- 11 Jang D S, Liu Y D, Kim J H, et al. Enhanced magnetorheology of soft magnetic carbonyl iron suspension with hard magnetic γ -Fe₂O₃ nanoparticle additive. *Colloid Polym Sci*, 2015, 293: 641–647
 - 12 Luo X P, Li T F, Yi H L, et al. Dissipative particle dynamics simulation of biomagnetic fluid flow and heat transfer (in Chinese). *Chin Sci Bull*, 2017, 62: 446–454 [罗小平, 李天富, 易红亮, 等. 生物磁流体传热的耗散粒子动力学模拟. *科学通报*, 2017, 62: 446–454]
 - 13 Guo C Y. Study on normal force of magnetorheological fluid and magnetorheological damper (in Chinese). Doctor Dissertation. Hefei: University of Science and Technology of China, 2013 [郭朝阳. 磁流变液法向力及减振器研究. 博士学位论文. 合肥: 中国科学技术大学, 2013]
 - 14 Liu M. Fluid dynamics of colloidal magnetic and electric liquid. *Phys Rev Lett*, 1995, 74: 4535
 - 15 Shahrivar K, Carreón-González E, Morillas J R, et al. Aggregation kinetics of carbonyl iron based magnetic suspensions in 2D. *Soft Matter*, 2017, 13: 2677–2685
 - 16 Li W H, Du H. Design and experimental evaluation of a magnetorheological brake. *Int J Adv Des Manuf Technol*, 2003, 21: 508–515
 - 17 Gedik E, Kurt H, Recebli Z, et al. Two-dimensional CFD simulation of magnetorheological fluid between two fixed parallel plates applied external magnetic field. *Comput Fluids*, 2012, 63: 128–134
 - 18 Okada K, Satoh A. Regime of aggregate structures and magneto-rheological characteristics of a magnetic rod-like particle suspension: Monte Carlo and Brownian dynamics simulations. *J Magn Magn Mater*, 2017, 437: 29–41
 - 19 Bahiuddin I, Mazlan S A, Shapiai M I, et al. A new constitutive model of a magneto-rheological fluid actuator using an extreme learning machine method. *Sens Actuators A*, 2018, 281: 209–221
 - 20 Pei L, Pang H M, Chen K H, et al. Simulation of the optimal diameter and wall thickness of hollow Fe₃O₄ microspheres in magnetorheological fluid. *Soft Matter*, 2018, 14: 5080–5091
 - 21 Sherman S G, Becnel A C, Wereley N M. Relating Mason number to Bingham number in magnetorheological fluids. *J Magn Magn Mater*, 2015, 380: 98–104
 - 22 Tang H S, Kalyon D M. Estimation of the parameters of Herschel-Bulkley fluid under wall slip using a combination of capillary and squeeze flow viscometers. *Rheol Acta*, 2004, 43: 80–88
 - 23 Dimakopoulos Y, Pavlidis M, Tsamopoulos J. Steady bubble rise in Herschel-Bulkley fluids and comparison of predictions via the augmented Lagrangian method with those via the Papanastasiou model. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2013, 200: 34–51
 - 24 Zhu H, Kim Y D, De Kee D. Non-Newtonian fluids with a yield stress. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2005, 129: 177–181
 - 25 Yang S P, Zhu K Q. Analytical solutions for squeeze flow of Bingham fluid with Navier slip condition. *J Non-Newton Fluid Mech*, 2006, 138: 173–180
 - 26 Mendes P R S, Dutra E S S. Viscosity function for yield-stress liquids. *Appl Rheol*, 2004, 14: 296–302
 - 27 Walawender W P, Chen T Y, Cala D F. An approximate Casson fluid model for tube flow of blood. *Biorheology*, 1975, 12: 111–119
 - 28 Bahrainian S S, Nabati A, Haji Davalloo E. Improved rheological model of oil-based drilling fluid for south-western Iranian oilfields. *J Pet Sci Technol*, 2018, 8: 53–71
 - 29 Kelessidis V C, Maglione R. Modeling rheological behavior of bentonite suspensions as Casson and Robertson-Stiff fluids using Newtonian and true shear rates in Couette viscometry. *Powder Technol*, 2006, 168: 134–147
 - 30 Liu T X. Study on the magneto-mechanical behavior of magnetorheological elastomer and its microstructure-based mechanism (in Chinese). Doctor Dissertation. Hefei: University of Science and Technology of China, 2015 [刘太祥. 磁流变塑性体磁致力学行为及其内部结构演化机理研究. 博士学位论文. 合肥: 中国科学技术大学, 2015]
 - 31 Keaveny E E, Maxey M R. Modeling the magnetic interactions between paramagnetic beads in magnetorheological fluids. *J Comput Phys*, 2008, 227: 9554–9571
 - 32 Ly H V, Reitich F, Jolly M R, et al. Simulations of particle dynamics in magnetorheological fluids. *J Comput Phys*, 1999, 155: 160–177
 - 33 Parsegian V A. *Van der Waals Forces: A Handbook for Biologists, Chemists, Engineers, and Physicists*. New York: Cambridge University Press, 2006. 149–163
 - 34 Klingenberg D J, Olk C H, Golden M A, et al. Effects of nonmagnetic interparticle forces on magnetorheological fluids. *J Phys: Condens Matter*, 2010, 22: 324101
 - 35 De Vicente J, Ramírez J. Effect of friction between particles in the dynamic response of model magnetic structures. *J Colloid Interface Sci*, 2007, 316: 867–876
 - 36 Pappas Y, Klingenberg D J. Simulations of magnetorheological suspensions in Poiseuille flow. *Rheol Acta*, 2006, 45: 621–629
 - 37 De Vicente J, Ruiz-López J A, Andablo-Reyes E, et al. Squeeze flow magnetorheology. *J Rheol*, 2011, 55: 753–779
 - 38 Engmann J, Servais C, Burbidge A S. Squeeze flow theory and applications to rheometry: A review. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 2005, 132: 1–27

- 39 Raphaelides S N, Gioldasi A. Elongational flow studies of set yogurt. *J Food Eng*, 2005, 70: 538–545
- 40 Covey G H, Stanmore B R. Use of the parallel-plate plastometer for the characterisation of viscous fluids with a yield stress. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1981, 8: 249–260
- 41 Williams E W, Rigby S G, Sproston J L, et al. Electrorheological fluids applied to an automotive engine mount. *J Non-Newton Fluid Mech*, 1993, 47: 221–238
- 42 Yang F Q. Tension and compression of electrorheological fluid. *J Colloid Interface Sci*, 1997, 192: 162–165
- 43 Ruiz-López J A, Wang Z W, Hidalgo-Alvarez R, et al. Simulations of model magnetorheological fluids in squeeze flow mode. *J Rheol*, 2017, 61: 871–881
- 44 Bossis G, Mathis C, Mimouni Z, et al. Magnetoviscosity of micronic suspensions. *Europhys Lett*, 1990, 11: 133
- 45 Tamura H, Doi M. Electro-rheological effects in a flow through a narrow slit. *J Phys Soc Jpn*, 1992, 61: 3984–3993
- 46 Wen Y H, Zhu R Z, Zhou F X, et al. An overview on molecular dynamics simulation (in Chinese). *Adv Mech*, 2003, 33: 65–73 [王玉华, 朱如曾, 周富信, 等. 分子动力学模拟的主要技术. *力学进展*, 2003, 33: 65–73]
- 47 Barski M, Chwał M, Kędziora P. Molecular dynamics in simulation of magneto-rheological fluids behavior. *Key Eng Mater*, 2013, 542: 11–27
- 48 Satoh A, Chantrell R W. Application of the dissipative particle dynamics method to magnetic colloidal dispersions. *Mol Phys*, 2006, 104: 3287–3302
- 49 Li W M, Li Q. Study about the structure and dynamics of magnetic nanofluids using a mesoscopic simulation approach. *Nonlinear Dyn*, 2018, 91: 2141–2155
- 50 Li W M, Jie O Y, Zhuang X. Dissipative particle dynamics simulation for the microstructures of ferromagnetic fluids. *Soft Mater*, 2016, 14: 87–95
- 51 Klingenberg D J, Van Swol F, Zukoski C F. Dynamic simulation of electrorheological suspensions. *J Chem Phys*, 1989, 91: 7888–7895
- 52 Michaelides E E. Brownian movement and thermophoresis of nanoparticles in liquids. *Int J Heat Mass Transfer*, 2015, 81: 179–187
- 53 Liu T X, Gu R, Gong X L, et al. Structural and rheological study of magnetic fluids using molecular dynamics. *MagnetoHydrodynamics*, 2010, 46: 257–269
- 54 Gong X L, Guo C Y, Xuan S H, et al. Oscillatory normal forces of magnetorheological fluids. *Soft Matter*, 2012, 8: 5256–5261
- 55 Wei S X, Shen Y, Huang Y J. Development and application of computational fluid dynamics (in Chinese). *J Hebei Inst Technol*, 2005, 27: 115–117 [魏淑贤, 沈跃, 黄延军. 计算流体力学的发展及应用. *河北理工学院学报*, 2005, 27: 115–117]
- 56 Mousavi S M, Darzi A A R, Akbari O A, et al. Numerical study of biomagnetic fluid flow in a duct with a constriction affected by a magnetic field. *J Magn Magn Mater*, 2019, 473: 42–50
- 57 Gong X L, Ruan X H, Xuan S H, et al. Magnetorheological damper working in squeeze mode. *Adv Mech Eng*, 2014, 6: 410158
- 58 Deng X G, Zong W G, Zhang L P, et al. Verification and validation in computational fluid dynamics (in Chinese). *Adv Mech*, 2007, 37: 279–288 [邓小刚, 宗文刚, 张来平, 等. 计算流体力学中的验证与确认. *力学进展*, 2007, 37: 279–288]
- 59 Bompos D A, Nikolakopoulos P G. CFD simulation of magnetorheological fluid journal bearings. *Simul Model Pract Th*, 2011, 19: 1035–1060
- 60 Lacis S, Gosko D. Direct numerical simulation of motion of ferromagnetic particles in magnetorheological suspension. *Integr Ferroelectr*, 2008, 102: 18–28
- 61 Han K, Feng Y T, Owen D R J. Three-dimensional modelling and simulation of magnetorheological fluids. *Int J Numer Meth Eng*, 2010, 84: 1273–1302
- 62 Gurubasavaraju T M, Kumar H, Mahalingam A. An approach for characterizing twin-tube shear-mode magnetorheological damper through coupled FE and CFD analysis. *J Braz Soc Mech Sci Eng*, 2018, 40: 139
- 63 He L, Tafti D K, Nagendra K. Evaluation of drag correlations using particle resolved simulations of spheres and ellipsoids in assembly. *Powder Technol*, 2017, 313: 332–343
- 64 Wang X C. Finite Element Method (in Chinese). Beijing: Tsinghua University Press, 2003. 14–19 [王勖成. 有限单元法. 北京: 清华大学出版社, 2003. 14–19]
- 65 Warnke K C. Finite-element modeling of the separation of magnetic microparticles in fluid. *IEEE Trans Magn*, 2003, 39: 1771–1777
- 66 Patel S A, Chhabra R P. Steady flow of Bingham plastic fluids past an elliptical cylinder. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 2013, 202: 32–53
- 67 Ma L, Song W L, Wang R S, et al. Study on shear stress model of magnetorheological fluids with distance weighted factors. *Smart Mater Struct*, 2017, 26: 065009
- 68 Samuel A L. Some studies in machine learning using the game of checkers. *IBM J Res Dev*, 1959, 3: 210–229
- 69 Zeinali M, Mazlan S A, Fatah A Y A, et al. A phenomenological dynamic model of a magnetorheological damper using a neuro-fuzzy system. *Smart Mater Struct*, 2013, 22: 125013

- 70 Zhao L F, Li Z, Caswell B, et al. Active learning of constitutive relation from mesoscopic dynamics for macroscopic modeling of non-Newtonian flows. *J Comput Phys*, 2018, 363: 116–127
- 71 Schmidt M, Lipson H. Distilling free-form natural laws from experimental data. *Science*, 2009, 324: 81–85
- 72 Upadhyay R V, Laherisheth Z, Shah K. Rheological properties of soft magnetic flake shaped iron particle based magnetorheological fluid in dynamic mode. *Smart Mater Struct*, 2013, 23: 015002
- 73 López-López M T, Kuzhir P, Bossis G. Magnetorheology of fiber suspensions. I. Experimental. *J Rheol*, 2009, 53: 115–126
- 74 Machovsky M, Mrlik M, Kuritka I, et al. Novel synthesis of core-shell urchin-like ZnO coated carbonyl iron microparticles and their magnetorheological activity. *RSC Adv*, 2014, 4: 996–1003
- 75 An J S, Han W J, Choi H J. Synthesis of hollow magnetite nanoparticles via self-assembly and their magnetorheological properties. *Colloids Surf A*, 2017, 535: 16–23
- 76 Satoh A. On aggregate structures in a rod-like haematite particle suspension by means of Brownian dynamics simulations. *Mol Phys*, 2014, 112: 2122–2137
- 77 Wu J, Pei L, Xuan S H, et al. Particle size dependent rheological property in magnetic fluid. *J Magn Magn Mater*, 2016, 408: 18–25
- 78 Pei L, Pang H M, Ruan X H, et al. Magnetorheology of a magnetic fluid based on Fe₃O₄ immobilized SiO₂ core-shell nanospheres: Experiments and molecular dynamics simulations. *RSC Adv*, 2017, 7: 8142–8150
- 79 Ruan X H, Pei L, Xuan S H, et al. The rheological responds of the superparamagnetic fluid based on Fe₃O₄ hollow nanospheres. *J Magn Magn Mater*, 2017, 429: 1–10
- 80 Liu T X, Gong X L, Xu Y G, et al. Magneto-induced stress enhancing effect in a colloidal suspension of paramagnetic and superparamagnetic particles dispersed in a ferrofluid medium. *Soft Matter*, 2014, 10: 813–818
- 81 Wang Z W, Shahrivar K, De Vicente J. Creep and recovery of magnetorheological fluids: Experiments and simulations. *J Rheol*, 2014, 58: 1725–1750
- 82 Son K J. A discrete element model for the influence of surfactants on sedimentation characteristics of magnetorheological fluids. *Korea-Aust Rheol*, 2018, 30: 29–39
- 83 Fernández-Toledano J C, Ruiz-López J A, Hidalgo-Álvarez R, et al. Simulations of polydisperse magnetorheological fluids: A structural and kinetic investigation. *J Rheol*, 2015, 59: 475–498
- 84 Segovia-Gutierrez J P, De Vicente J, Hidalgo-Alvarez R, et al. Brownian dynamics simulations in magnetorheology and comparison with experiments. *Soft Matter*, 2013, 9: 6970–6977
- 85 Ruiz-López J A, Wang Z W, Fernández-Toledano J C, et al. Start-up rheometry of highly polydisperse magnetorheological fluids: Experiments and simulations. *Rheol Acta*, 2016, 55: 245–256
- 86 Haik Y, Chen J C, Pai V M. Development of biomagnetic fluid dynamics. *Inter Symp Trans Proper Thermal Fluids Eng*, 1996, 25: 121–126
- 87 Tzirtzilakis E E. A mathematical model for blood flow in magnetic field. *Phys Fluids*, 2005, 17: 077103
- 88 Türk Ö, Bozkaya C, Tezer-Sezgin M. A FEM approach to biomagnetic fluid flow in multiple stenosed channels. *Comput Fluids*, 2014, 97: 40–51
- 89 Sharifi A, Motlagh S Y, Badfar H. Ferro hydro dynamic analysis of heat transfer and biomagnetic fluid flow in channel under the effect of two inclined permanent magnets. *J Magn Magn Mater*, 2019, 472: 115–122

Summary for “磁性液体数值模拟研究进展”

Recent progress on the simulation technology of magnetic fluid

Lei Pei, Xinglong Gong & Shouhu Xuan*

Key Laboratory of Mechanical Behavior and Design of Materials, Center for Excellence in Complex System Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Department of Modern Mechanics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China

* Corresponding author, E-mail: xuansh@ustc.edu.cn

Magnetic fluid is a novel magnetorheological (MR) intelligent material consisting of magnetic particles, non-magnetic matrix, and additive agents. After applying the external magnetic field, magnetic particles will interact with each other due to the magnetic dipolar forces. The viscosity and yield stress of magnetic fluid could increase several orders of magnitude in milliseconds, which is called the MR effect. The controllable and reversible property makes magnetic fluid widely applied in drug targeting delivery, magnetic thermal therapy, commercial dampers, and polishing etc. In order to comprehend the mechanical behaviors of magnetic fluid, researchers developed several theoretical models for different flow conditions. However, due to the extensive calculation, theoretical models are only applicable for some special problems, such as 2-dimensional and axial symmetry. In recent years, with the development of computer performance, simulation has become an important method to investigate the MR mechanism of magnetic fluid. This paper reviews the recent progress in the theory and simulation of magnetic fluid. Firstly, theoretical models of magnetic fluid under shear mode, squeeze mode, and valve mode are introduced. Secondly, the existing simulation methods for magnetic fluid, such as molecular dynamics, particle-level dynamic simulation, and finite element method, are illustrated. The validity of the methods and their merits and drawbacks are discussed. Then, the research progress of the simulation of magnetic fluid is summarized from 3 aspects: Simulations of mechanical properties of novel magnetic fluid, simulations of complex mechanical behaviors of conventional magnetic fluid, and simulations of biomagnetic fluid. Finally, some future trends of simulation of magnetic fluid are proposed. The following 3 topics should be emphasized in the future work. First, a comprehensive theoretical model considering a variety of microscopic interactions is required. In order to prepare magnetic particles with high MR effect, excellent dispersibility, and low density, surface coating, modification, and additive agents are usually applied in experiments. Unfortunately, the influence of non-magnetic components on the MR effect is seldom considered in simulations. Second, current simulations could not simultaneously obtain the macroscopic mechanical properties and microstructures of magnetic fluid in complex flow. Finite element method and computational fluid dynamics are applicable for complex macroscopic problems but can not obtain the microstructures at the same time. Mesoscopic simulation methods can not exhibit large-scale aggregations of particles, which leads to the deviation compared with experiments. To establish multi-scale simulation methods and improve the accuracy of simulations have become an urgent requirement. Combining simulation methods with different spatial scales and reducing the time cost by using machine learning have become a possible approach. Third, multi-physics coupling simulation methods should be established. The magnetic field controlled electrical properties of magnetic fluid have attracted researchers' interest in recent years. Magnetic fluid with this novel controllable property could be widely applied in battery and sensors. Investigations on other physical properties of magnetic fluid by using mechanical, electrical, and magnetic model together will be a future trend. These achievements will all contribute to the development of high-performance magnetic fluids and further enlarge the range of applications of magnetic fluid.

magnetic fluid, magnetorheological, mechanical property, mechanical model, simulation

doi: 10.1360/N972018-01068