

聚合物复杂流体流动的动力学模拟

赵得禄 李险峰

(中国科学院化学研究所高分子物理实验室, 北京, 100080)

摘要 介绍聚合物复杂流体流动问题的模拟方法。通过比较, 指出了经典有限元方法的局限性和拉格朗日-欧拉方法在模拟复杂流动问题上的优越性。拉格朗日-欧拉方法的模拟结果同聚合物流体复杂流动的实验结果相一致, 表明该方法在对复杂流体的动力学行为的模拟中是合理的和可行的。

关键词 复杂流体, 有限元方法, 拉格朗日-欧拉方法

复杂流体是指聚合物流体以及填充了各种形状固体颗粒的熔体、溶液、泡沫、胶体颗粒、胶束等的多组分液体物质。它们的共同特点是流动性质的复杂性以及在外力场中流动行为分析的困难性。对复杂流体的研究就是从它的凝聚态结构出发, 阐明和预报体系的平衡态和非平衡态的物理性质, 最后达到能够定量地描述它在外力场中的流动行为。这相当于在微观结构, 宏观流动性质, 以及以后的材料加工性能之间建立起一座桥梁。复杂流体的研究对工业应用和新技术发明有着重要的指导意义。例如, 聚合物、共聚物及其复合材料、化学纤维的加工性能都依赖于其熔体的流变性质; 采油技术需要驱油剂; 食品加工, 日用化工、环境去污、涂料、医药等工业以及新兴的复印技术、油墨喷射、胶片成影、高性能润滑油、液晶显示屏等高新技术中无一不充满有各种超分子体材料。在学术上, 复杂流体这一新兴学科为融合高分子学科和一些传统学科如统计物理学、力学、化学、生物学、计算数值模拟、工程技术学等提供了广阔的空间。近来, 随着高速计算机的普及, 复杂流体研究的热点正向着高弹性液体的复杂流动问题转移。对聚合物流体流动的研究自然成为这一领域中的最为活跃的分枝。其主要研究方向包括两个方面: (1) 在流变学上, 如何建立聚合物流体的本构方程; (2) 在流体力学上, 如何精确求解高度非线性、非局域的偏微分方程。

1 控制方程

对于不可压缩绝热流体(不计体力), 动量守恒方程和不可压缩条件分别为:

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \nabla \cdot \tau(t) - \nabla p \quad (1)$$

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (2)$$

式中, ρ 为密度, v 为速度矢量, p 为各向同性的压力, $D/Dt (= \partial/\partial t + v \cdot \nabla)$ 为物质导数, $\tau(t)$ 为 Cauchy 应力张量, 可以分解为:

$$\tau(t) = 2\eta D + \tau(t) \quad (3)$$

其中的 η 为牛顿粘度, D 为应变率张量。 $2\eta D$ 和 τ 分别为纯粘性牛顿应力项和附加粘弹应力张量, 后者需要采用适当的本构方程来计算。

2 本构方程

高分子流体是典型的粘弹性材料, 其流动行为介于纯弹性体和高粘性体之间。本构方程描述了它在外力作用下的响应。本构方程建立的宗旨是能够尽可能地反映高分子的物理实在, 尽可能准确地描写各种实际的流变性质。目前建立本构方程的途径主要有两条, 一是从连续介质力学的基本原理出发, 二是根据实验结果得到近似的分子模型, 再建立基于“分子理论”的本构关系。本构方程分为微分型和积分型两类^[1~4], 下面介绍几种常用的微分型本构方程。

2.1 Oldroyd-B(OB) 流体

它的本构方程是最简单的。附加应力张量 τ 满足以下关系式

$$\tau + \lambda \overset{\nabla}{\tau} = 2\eta \dot{\gamma} \quad (4)$$

式中 η 和 λ 分别为粘度和松弛时间。 $\overset{\nabla}{\tau}$ 为逆变时间导数。

为保证流体力学控制方程解的唯一,需要剪切应力(τ_y)随剪切速率($\dot{\gamma}$)单调增加,对于高分子溶液,

$$\tau_y = \frac{\eta \dot{\gamma}}{1 + a(2 - a)(\lambda \dot{\gamma})^2} + \eta \dot{\gamma} \quad (5)$$

式中, a 是个标量参数 $0 \leq a \leq 2$ 。 η 和 η 分别为高分子和溶剂的粘度。为满足上述条件,必须 $\eta \geq 8\eta$ 。这种本构方程虽然只包含了两个或三个材料参数,但却能定性地得到聚合物流体的许多宏观流动性质。OB 流体的特点是具有恒定的剪切粘度和可以无限大的拉伸粘度,其第一法向应力差是剪切速率的二次函数,第二法向应力差为零。严格地说,它只是一种理想的流体模型。但它是在数值方法中最难进行模拟的流体之一,因此人们将其做为一种标准的流体模型,来检验数值算法的可靠性和准确性^[5,6]。

2.2 Phan Thien-Tanner(PTT) 流体

它的单松弛时间微分型本构方程的一般形式为:

$$A(\tau, \lambda) \cdot \tau + \lambda \frac{\delta \tau}{\delta t} = 2\eta D \quad (6)$$

式中,应力的时间微商是协变时间导数 $\overset{\Delta}{\tau}$ 和逆变时间导数 $\overset{\nabla}{\tau}$ 的线性组合,即

$$\frac{\delta \tau}{\delta t} = \xi \overset{\Delta}{\tau} + (1 - \xi) \overset{\nabla}{\tau} \quad 0 \leq \xi \leq 1 \quad (7)$$

式(6)中的 $A(\tau, \lambda)$ 是一个与具体模型有关的张量。对 PTT 流体,

$$A(\tau, \lambda) = \exp \left[\frac{\epsilon \lambda}{\eta} \text{tr}(\tau) \right] I \quad (8)$$

其中 ξ 和 ϵ 为材料参数, ξ 主要对剪切粘度和法向应力有影响(导致剪切变稀),而 ϵ 主要对稳态拉伸粘度有影响(导致稳态拉伸粘度减小)^[7]。由于这种本构方程具有随剪切变稀的粘度,法向应力差随剪切速率的变化规律与实验结果吻合较好,所以它更为接近真实聚合物流体。

2.3 FENE, FENE-P 和 FENE-CR 流体

这三种类型的流体均源于分子的哑铃模型,近来常用于对高分子稀溶液收缩流动模拟中^[8,9]。虽然 FENE-P 和 FENE-CR 是在 FENE 基础之上发展起来的,但它们得到的结果会有很大的不同,因此可以认为这三种流体模型是独立的。有关它们的详细比较的论述可参阅文献^[10,11]。

对分散在稀溶液中的高分子链,最简单的动力学理论将其处理成由 Hook 弹簧连接起来的哑铃。这种处理方式能很好地描述高分子链在其平衡态附近的微小形变。其主要不足在于:(1) 剪切粘度不能改变;(2) 分子链能被无限拉伸。FENE 模型的出发点就是为了对此加以修正,即让弹簧只能被有限拉伸,弹性应力与应变之间遵循某种非线性关系,弹簧形变越大,非线性越强。这样每个哑铃上的弹性力张量 F 与形变张量 L 之间的关系为

$$F = \frac{1}{1 - L^2/l_{\max}^2} L \quad (9)$$

这里设弹簧倔强系数为 1, $l_{\max}$ 为弹簧的最大伸长量。FENE 模型虽然物理意义明确,但在数值解法上困难极大。这是因为在建立宏观本构方程时,需要对分子链上所有的哑铃进行统计, FENE 模型依据 Fokker-Planck 方程来求算各个哑铃的构型概率密度函数,然而在此情况下该方程无解析解。如果用计算机求模拟解,必然会大大增加计算量。因此,一种较好的近似是基于 Peterlin 的预平均方法^[12],即取 L^2 为系综平均值 $\langle L^2 \rangle$ 。如此,有

$$F = \frac{1}{1 - \langle L^2 \rangle / l_{\max}^2} L \quad (10)$$

这就是所谓的 FENE-P 模型。该模型本身具有自恰的线性,对均相流动 Fokker-Planck 方程有高斯解。哑铃在流场中构型随时间的变化为

$$\frac{\partial A}{\partial t} + v \cdot \nabla A - A \cdot \nabla v - \nabla v^T \cdot A = -\frac{f(A - I)}{\lambda} \quad (11)$$

式中, A 为哑铃末端矢 R 的并积 RR 的系综平均。 v 为哑铃中心的速度, λ 为松弛时间。 f 为 FENE 因子:

$$f = \frac{l_{\max}^2}{l_{\max}^2 - \langle L^2 \rangle} \quad (12)$$

式中, $\langle L^2 \rangle = \text{trace}(A)$ 。FENE-CR 模型同 FENE-P 一样也是采取 Peterlin 近似, 所不同的是 FENE-CR 具有恒定的稳态剪切粘度。对 FENE-CR, (11) 式改写为

$$\frac{\partial A}{\partial t} + v \cdot \nabla A - A \cdot \nabla v - \nabla v^T \cdot A = -\frac{f}{\lambda}(A - I) \quad (13)$$

根据 FENE-P 和 FENE-CR 模型, 聚合物稀溶液流体的附加应力为

$$\tau = \frac{\eta_f}{\lambda}(A - I) = Gf(A - I) \quad (14)$$

其中各物理量的定义与上同, G 为模量, $G = \eta/\lambda$

采用 Peterlin 近似的 FENE-P 和 FENE-CR 已与 FENE 有较大的不同, 这些不同主要表现在聚合物稀溶液与时间相关的流变学性质上。这是由于 FENE 在各个时刻均要考虑每个哑铃的构型, 而 FENE-P 和 FENE-CR 带入的哑铃构型是对所有哑铃的预先平均。其中只有 FENE-CR 能够描述具有恒定剪切粘度和第二法向应力为零的 Boger 流体^[13]的流动。在应用具体的模型时要根据实际的流动特点和要研究的流变学性质来决定。

3 聚合物流体流动问题的数值方法

求解与应变历史相关的复杂流体流动问题始于 70 年代末, 迄今已经有了长足发展。在其各个发展阶段均有权威性的总结与展望^[14~17]。下文仅就目前最为常用的有限元方法以及在我们的工作中所使用的拉格朗日-欧拉方法做简单介绍。

3.1 有限元方法

既然控制聚物流体流动的方程组具有高非线性和非局性的特点, 那么就要对整个求解空间做离散处理, 即通过划分网格做局部线性化近似, 把求解非线性偏微分方程约化成为求解每一时刻的线性方程组, 之后再依照一定的初始条件或边界条件进行求解。这是求解该类问题的所有方法的出发点。在模拟高粘弹性的聚物流体, 计算流动区域 Ω 内的速度场、压力场和应力场时, 有限元方法最为常用。下面给出 OB 流体的有限元差分格式。根据 (1) 和 (2) 式, 对忽略惯性效应的蠕动流, 在速度场和压力场所属的函数空间 V 和 P 内, Galerkin 方程的弱形式可表示为^[15]:

$$\int_{\Omega} -\nabla p + \nabla \cdot \mathbf{q} \cdot \mathbf{u} d\Omega = 0, \quad \forall \mathbf{u} \in V \quad (15)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v} q d\Omega = 0, \quad \forall q \in P \quad (16)$$

(16) 式分部积分的结果为:

$$\int_{\Omega} -p I + \mathbf{q} \cdot \nabla \mathbf{u}^T d\Omega = \int_{\partial\Omega} F \cdot \mathbf{u} d\sum, \quad \forall \mathbf{u} \in V \quad (17)$$

这里 F 为作用在边界 $\partial\Omega$ 上的表面力。

在有限单元剖分区域 Ω 内, 速度和压力(分属函数子空间 V^h 和 P^h) 可近似表示为:

$$\mathbf{v}^h = \sum_i V^i \Psi, \quad p^h = \sum_i P^i \Phi \quad (18)$$

式中, V^i 和 P^i 分别为单元节点的速度和压力, Ψ 和 Φ 为插值函数(形函数)。设 $\mathbf{v}^h$ 和 p^h 仍满足 (16) 和 (17) 式, 即,

$$\int_{\Omega} -p^h I + \Phi \cdot \nabla \mathbf{u}^h d\Omega = \int_{\partial\Omega} F \cdot \mathbf{u}^h d\sum, \quad \forall \mathbf{u}^h \in V^h \quad (19)$$

$$\int_{\Omega} \nabla \cdot \mathbf{v}^h q^h d\Omega = 0, \quad \forall q^h \in P^h \quad (20)$$

这两个方程是有限元算法计算速度场和压力场的出发点。进一步问题是如何来计算应力张量 σ 。对聚合物流体, 计算 σ 的复杂性在于 σ 是应变历史的函数, 它是速度场的隐式函数, 即不能直接用速度或其微分的代数方程来表示。按照计算 σ 的方式的不同, 模拟的方法分为两类: 耦合法和解耦合法。

耦合法最初由 Kawahara 和 Takeuchi 用于粘弹流体的模拟。此种方法将 σ 视为未知量, 对应力-速度-压力同时进行求解。此时, 在应力的函数子空间 $\mathcal{Z}$ 内, σ 可近似表示为:

$$\sigma = \sum_i \sigma \varphi \quad (21)$$

其中, σ 为单元节点的应力, φ 为形函数。根据 (4) 式, 应力的 Galerkin 方程的弱形式为:

$$\int_{\Omega} (\dot{\epsilon} + \lambda \dot{\epsilon} - 2 \eta \dot{\epsilon}) \cdot S^h d\Omega = 0, \quad \forall S^h \in \mathcal{Z} \quad (22)$$

耦合法是将所有的未知量放在方程组中一起计算, 其优点是可以直接利用 Newton-Raphson 方程对非线性系统求解, 缺点是变量多, 运算量较大。

解耦合法将动力学参数(即压力和速度)与应力分开处理, 是一类基于迭代的方法。即计算速度和压力场时用上一轮的应力值, 然后用所得速度和压力的结果计算新的应力, 通过反复迭代使所有的未知量收敛。设在第 n 步迭代得到的速度场为 v_n^h , 压力场为 p_n^h , 应力场为 $\dot{\epsilon}_n^h$ 。则在第 $n+1$ 步的应力场为:

$$\dot{\epsilon}_{n+1}^h = \dot{\epsilon}_n^h + 2 \eta \dot{\epsilon}^h \quad (23)$$

其中, $\dot{\epsilon}^h$ 为应变率的变化量。(27) 式等价于:

$$\int_{\Omega^h} (-p^h I + 2 \eta \dot{\epsilon}^h) \cdot \nabla u^{hT} d\Omega = - \int_{\Omega^h} \dot{\epsilon} \cdot \nabla u^{hT} d\Omega + \int_{\partial\Omega} F \cdot u^h d\sum, \quad \forall u^h \in V^h \quad (24)$$

此时, $\dot{\epsilon}$ 被视为体力, 方程 (24) 和 (20) 可通过求解一般牛顿流问题的速度-压力耦合方法求解。显然, 解耦合法中的变量较少, 能够节省计算成本, 但收敛性较耦合差, 迭代次数大大增加。

有限元方法存在着以下的基本问题。

3.1.1 迭代的收敛性和算法的稳定性 所谓收敛性是指随着迭代的进行, 连续两步迭代所得的物理量的解之间的偏差应逐渐减小, 在小于某个预先给定的容许偏差后, 迭代过程完成。算法的稳定性是指随着有限元网格分辨率的提高, 即网格在逐渐加密而其它条件不变时, 用这些网格所得到的解之间的偏差应逐渐减小。对迭代收敛性和解的稳定性的考察, 是论证某个算法是否可行的首要步骤。然而, 长期以来, 几乎所有的对高粘态流体的计算方法(包括有限元方法)的收敛性和稳定性都是局限在一定的范围内。换句话说, 对于粘弹效应比较显著的复杂流体流动问题收敛困难, 并难以得到稳定的物理解, 这是当前最为突出的一个问题。

3.1.2 高 Weissenberg 数问题 Weissenberg 数 (We) 是高分子流体弹性力和粘性力相对比较的无量纲参数。这个数越大意味着流体的弹性应力效应越显著, 但是带来的计算上的困难也就越大。在数值模拟中, 该问题的表现方式是^[15](耦合法), 在较低 We , 模拟解唯一存在[图 1(1)]; 在某一临界的 We 之后, 模拟结果呈现多解特征, 出现分岔[图 1(2)]; 图 1(3) 给出极限 We 出现的另一种情况, 即在临界 We 之后, 解族沿其它分岔回到低 We 的情形。

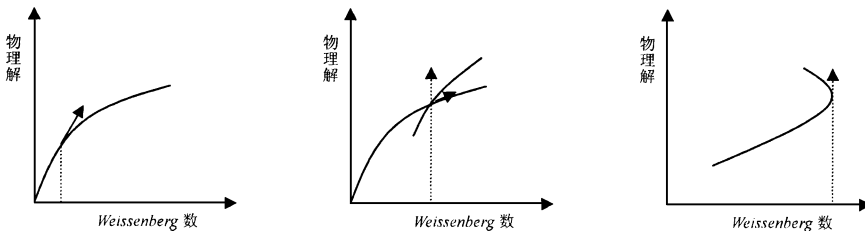


图 1 流场解的情况 (1) 正常点; (2) 分岔点; (3) 极限点

实验研究表明, 实际的流动在较高 We 时并未出现不稳定现象。可见, 数值模拟在临界 We 后收敛失效是没有物理背景的。Crochet 认为^[15], 该问题是由于现有算法的精确性不足而导致的。以下三个方面的原因使得算法易于受计算精度的影响。首先, 在复杂流动中, 流场的局部由于法向应力的升高会导致高应力边界层的存在, 其中高应

力梯度对计算精度(应力)有非常大的影响(尤其对耦合方法);其次,流场局部的几何奇异点附近存在非常高的应力,甚至在某些情况下这些应力是不可积的^[18]。应力奇异性问题的本质以及奇点应力对计算流动本体内应力的影响情况目前还尚未阐明,目前已证实的是应力奇异性问题是导致大多数计算不稳定的一个直接原因;第三,由流体力学控制方程和本构方程组成的 Navier Stokes 方程组中即包括椭圆型偏微分方程,又包括双曲型偏微分方程。数值算法的不精确性可能导致应力张量正定性的改变。这种类型的变化对椭圆性偏微分方程的解影响不大,但对双曲型偏微分方程的解会造成非常大的误差。在经典的有限元方法中,为提高临界 We , 一般是通过选用更好的本构方程、在流场几何的奇点附近加密离散网格、合理地确定边界条件(如使用滑移边界条件)等。目前,较为有代表性的有限元方法包括 SUPG(streamline-upwind/Petrov-Galerkin)方法^[19], EVSS(elastic viscous stress splitting)方法^[20,21], DEVSS(discrete EVSS)方法等等^[22],然而,值得一提的是,虽然这些方法能将临界 We 提高很多,但这并不意味着高 We 问题已经得到了根本解决。

3.2 拉格朗日-欧拉动态模拟方法

目前,绝大多数的计算方法,如有限元、有限差分等都是基于固定的三角形或四边形网格的欧拉坐标系(欧拉方法)。这些方法的问题是在高非线性区域内难以甚至根本得不到物理解,其原因是相当复杂的。从数学角度上看,如上面一节讨论的,主要原因有应力场的奇异性、偏微分方程改变类型、数值迭代不收敛等。但从物理本质而言,高分子流体流场的演化要求数值算法能如实地反映流动单元的应变历史由上游向下游传递这样一个物理过程,准确计算每一流动单元的应变历史和流线是解决问题的关键。这一点恰恰是单纯的欧拉方法难以胜任的。另一种在流体力学计算中较为行之有效的方法基于网格随流体一起流动的拉格朗日坐标系(拉格朗日方法)。此类方法虽然能清晰地计算出流体的界面,清楚地反映出流体内部运动的细节。但不能处理滑移和大畸变的流体运动,不能处理自由界面的流体(如聚合物挤出过程),并且在不可压缩条件的迭代处理过程中效率极低。

对于高粘弹性流体,理想的数值模拟方法是由袁学锋等人发展起来的拉格朗日-欧拉动态方法^[23]。其独特之处是利用随时间移动的多边形网格来跟踪流体单元在流场中的运动轨迹和形变状况,在拉格朗日步骤中根据流动单元的应变情况求解非线性应力项;而在任意时刻下,定义在网格上的流场物理量如速度、压力等可以在欧拉步骤中通过迭代相应的控制方程求得。然后,再以时间步长 Δt 移动网格到下一时刻,同时计算这一时刻应有的粘弹应力。如此循环处理,不仅能反映流动单元在流场中的自然流动过程,详尽记录其变化细节,而且保证了整个计算过程是向物理解逼近而不是没有物理意义的数学解。这种处理对于研究高分子流体的不稳定流动尤为重要。该方法具有普遍性,已经被用于模拟高分子流体^[23,24]、浓悬浮液^[25]、泡沫^[26]和乳液^[27]等多种复杂流体体系。另外,对由于本构关系的多值性导致的多个率相共存的流动体系,在研究这些率相在流场中的演变及其界面的动态行为时,拉格朗日-欧拉动态方法是迄今为止最为直接、可靠的方法^[28,29]。

以下我们对拉格朗日-欧拉方法中的网格划分方式和差分格式做简单介绍,有关这些方面的详细资料可参见文献^[23]和^[27]。

3.2.1 流场内网格的划分方法 拉格朗日-欧拉方法中使用的是多边形网格,是通过将整个求解区域按 Voronoi 规则划分而得到的。以二维流动体系为例,Voronoi 规则的含义是:将流场中最近邻点连接形成 Delaunay 三角形,以相邻 Delaunay 三角形外接圆的圆心为顶点,连接这些顶点就将整个流场划分为许多个相互连接的多边形,每个多边形就是一个所谓的 Voronoi 单元[图 2(a)]。这种划分流场的方式主要有如下两个优点:(1) 每一个 Voronoi 单元唯一地包含流场中的一个点,在流动过程中,所有的单元不会发生相交现象;(2) 流场中的点流动时,Voronoi 单元的边长和面积连续地变化。

在该方法中,其网格的构造方式能够确保流动单元在流场中沿着流线做连续的、平滑的运动。并且在流动发生一段时间之后,各流动单元及其相邻点的位置发生变化,还要按 Voronoi 规则重新划分流场[图 2(b)],由于这种划分方式仍然是连续性的,就保证了流场的构型变化也是连续的。

3.2.2 差分格式 拉格朗日-欧拉方法在构造差分格式时,流动单元的应变率、粘弹应力和压力都定义在 Voronoi 多边形的中心,而速度分别定义在 Voronoi 多边形的中心和顶点上。下面我们对二维流动问题给出流场物理量求法^[27]。

根据(3)式可知若要求解应力必须首先知道流动单元的应变率张量 D ,而 D 是速度梯度(∇v)的函数

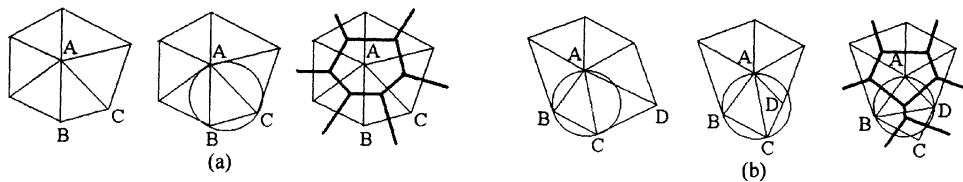


图 2 (a) 由 Delaunay 三角形(' - ') 生成 Voronoi 多边形(' - ');(b) Voronoi(' - ') 多边形的重新连接

[$D = 0.5(\nabla v + \nabla v^T)$]. 参考图 3, 在某个流动单元 i 内, 速度梯度可按下式求得:

$$(\nabla v)_{e(ij)} = \frac{1}{A_{e(ij)}} \int_k n_k v_k dl_k = \frac{1}{A_{e(ij)}} \sum_k n_k v_k \Delta_k \quad (25)$$

式中, $e(ij)$ 是其中的一个小四边形单元, 所有以 $e(ij)$ 为代表的四边形单元都具有相同的顶点 i , 并各有一个流动单元 i 的顶点 j , 其它两个顶点分别是 j 所在的两条边的中点。对某个四边形单元, $A_{e(ij)}$ 为其面积, v_k 是第 k 条边的速度, 是该边上两个顶点速度的平均, n_k 是第 k 条边的外法向量, l_k 是第 k 条边的边长, 上式的求和按逆时针方向进行。一旦求出了速度梯度, 便可得到 $e(ij)$ 的平均应变率张量 $D_{e(ij)}$ 以及作用在其上的平均应力 $\mathbf{q}_{(ij)} = \mathbf{T}_{e(ij)} + \mathbf{T}_{e(ij)}$ 。进而我们可以得到作用在流动单元上的平均应力, 表示为

$$\nabla \cdot \mathbf{q} = \frac{1}{A_i} \int_j n_j \cdot \mathbf{q}_j dl_j = \frac{1}{A_i} \sum_j [n_{bj} + n_{jc}]_{e(ij)} \cdot \mathbf{q}_{(ij)} \Delta_j \quad (26)$$

其中, A_i 为流动单元的面积, n_{bj} 和 n_{jc} 是四边形单元 $e(ij)$ 的两条边 b_j 和 c_j 的外法向量, $\Delta_j = l_{bj} + l_{cj}$ 。式中对四边形单元的求和仍按逆时针方向。根据受力平均条件, 自然有 $\nabla \cdot \mathbf{q}_{(ij)} = 0$ 。同理, 我们可以通过对各个流动单元的顶点 j 周围的小四边形单元做积分(按逆时针方向), 求出作用在 j 上的平均应力, 即

$$(\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - p \mathbf{I})_j = \frac{1}{A_j} \int_i n_i \cdot [\boldsymbol{\sigma} - p \mathbf{I}] dl_i = \frac{1}{A_j} \sum_i [n_{ci} + n_{ib}]_{e(ij)} \cdot [\mathbf{q}_{(ij)} - p_i \mathbf{I}] \Delta_i = 0 \quad (27)$$

其中, A_j 为顶点 j 周围的小四边形单元面积之和, n_{ci} 和 n_{ib} 是四边形单元 $e(ij)$ 的两条边 ci 和 ib 的外法向量, $\Delta_i = l_{ci} + l_{ib}$ 。此时仍有 $(\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} - p \mathbf{I})_j = 0$ 。上式中的压力 p_i 需要根据不可压缩条件(2)式迭代求得。这里(2)式有如下的差分格式:

$$\nabla \cdot \mathbf{v}_i = \frac{1}{A_i} \sum_j (n_{bj} + n_{jc}) \cdot \mathbf{v}_j \Delta_j = 0 \quad (28)$$

这里, $\mathbf{v}_j$ 是顶点 j 的速度, 其它变量的意义与(28)式相同。

3.2.3 计算结果与实际流动问题的比较 为了验证该算法的准确性和解决实际问题的能力, 我们进行了一系列工作, 其中包括将计算结果与两个较为重要的粘弹流实验结果的比较。这两个实验分别是由 Quinzani 等人^[30]完成的 4:1 平面收缩流动实验和 Baaijens 等人^[31]完成的平面绕流实验, 流场几何见图 4(a)、(b), 其中, x 和 y 分别为平面的横、纵坐标。

图 5 和图 6 给出了稳态流动模拟结果。计算中采用的是 PTT 型本构方程。其中, 图 5 给出的分别是在流场内

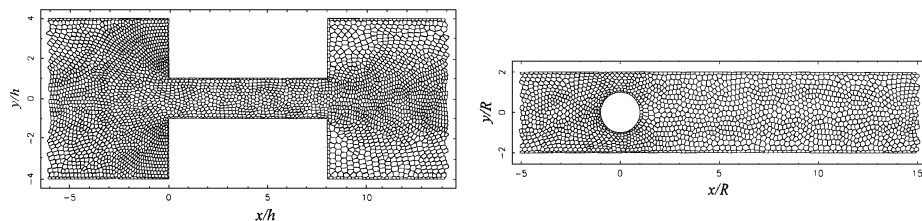


图 4 (a) 平面收缩流动的流场几何; (b) 平面绕流的流场几何

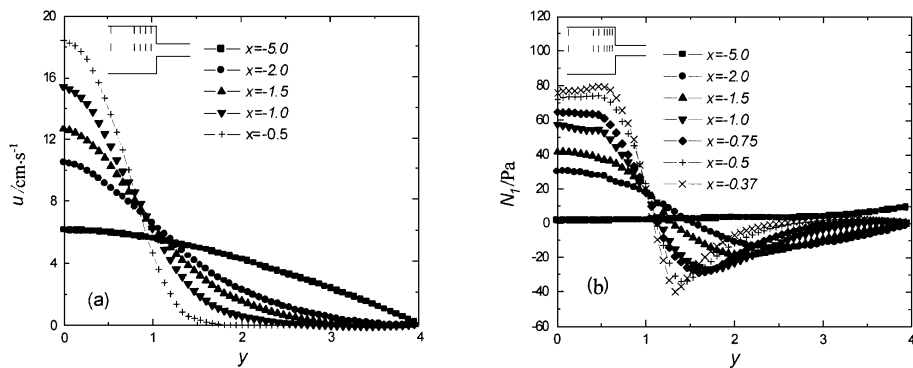


图5 平面收缩流动的流场内:(a)速度(u)分布;(b)第一法向应力差(N_1)分布($De=3.0$)

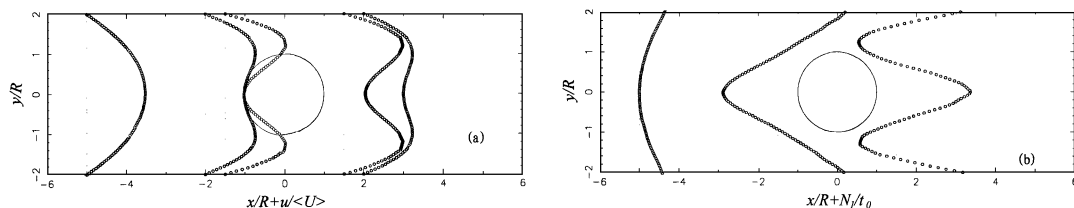


图6 平面绕流流场内:(a)速度($u/\langle U \rangle$)分布;(b)第一法向应力差(N_1/τ)分布($De=0.93$)

各个位置沿与流动方向垂直的 y 方向上水平速度分量(u)和第一法向应力差(N_1)的分布。这里 Deborah 数(De)的定义为:

$$De = \frac{\lambda \langle U \rangle}{h} \quad (29)$$

其中 $\langle U \rangle$ 为平均流速, h 为下游管道的宽度。在图6给出的物理量沿 y 方向上的分布中, 水平速度分量(u)和第一法向应力差(N_1)分别用平均流速 $\langle U \rangle$ 和参考应力 $\tau^{[31,32]}$ 约化。而 De 的定义为:

$$De = \frac{\lambda \langle U \rangle}{R} \quad (30)$$

以上的模拟结果与实验测量结果^[30,31]是相当吻合的。可见, 拉格朗日-欧拉方法能够在定性上乃至在定量上准确地预报高分子复杂流体的流动行为, 该方法在描述真实的物理过程时是合理、准确的。

拉格朗日-欧拉方法描述的是流动单元的自然流动过程, 能够记录与时间相关的流动历史, 保证了模拟结果至少是在向物理解逼近, 而不会得到没有意义非物理解, 因此在模拟界面相互作用问题、流动向充分发展的过程、不稳定流动等问题方面, 此方法有非常好的应用前景。目前, 此方法主要的问题是计算时间花费较大, 急待解决的是提高效率, 但是随着高速计算机的进一步的发展和普及, 这个问题会相对淡化, 而且计算效率还有进一步提高的研究余地。这些计算可以应用到聚合物挤出、注塑、压延、涂层等实际问题中去, 以模拟演示聚合物的加工工艺过程, 促进和带动聚合物加工工程物理学的发展, 为计算机设计模具和其它加工机械建立理论基础。

致谢 本工作得到国家自然科学基金重点资助项目“高聚物复杂流体的结构、序态及动力学行为的研究”、国家科学技术部攀登计划“高分子凝聚态物理基本问题研究”及攀登 B 子课题“多孔介质流变学研究”的资助, 特此致谢。同时感谢英国 Bristol 大学袁学锋博士的密切合作。

4 参考文献

- 1 Tanner R I, Engineering Rheology, Oxford: Clarendon Press, 1985
- 2 Bird R B, Curtiss C F, Armstrong R C, Hassager O, Dynamics of Polymeric Liquids, Vol. 2, Kinetic Theory, 2nd edition, John

Wiley & Sons, 1987

- 3 Larson R G · Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions, Boston: Butterworths, 1988
- 4 Barnes H A, Hutton J F, Walters K · An Introduction to Rheology, Amsterdam: Elsevier, 1989
- 5 Brown R A, McKinley G H · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1994, 52: 407
- 6 Caswell B · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1996, 62: 99
- 7 Debbaut B, Marchal J M, Crochet M J · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1988, 29: 119
- 8 Azaiez J, Guénette R A, Kadi A · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1996, 62: 253
- 9 Purnode B, Crochet M J · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1996, 65: 269
- 10 Herrchen M, Ziegler H C · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1997, 68: 17
- 11 Van Heel A P G, Hulsen M A, Van den Brule B H A · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1998, 75: 253
- 12 Peterlin A · J Polym Sci, Polym Lett, 1966, 4: 287
- 13 Boger D V · Exp Therm Fluid Sci, 1996, 12: 234
- 14 Crochet M J, Davies A R, Walters K · Numerical Simulation of Non-Newtonian Flow, Amsterdam: Elsevier, 1984
- 15 Crochet M J · Rubb Chem Technol, 1989, 62: 426
- 16 Keunings R · C L Tucker (Ed.), Computer Modeling for Polymer Processing, Munich: Hanser, 1989
- 17 Baaijens F P T · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1998, 79: 361
- 18 Lipscomb G G, Keunings R, Denn M M · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1987, 24: 85
- 19 Marchal J M, Crochet M J · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1987, 26: 77
- 20 Beris A N, Armstrong R C, Brown R A · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1984, 16: 141
- 21 Beris A N, Armstrong R C, Brown R A · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1986, 19: 323
- 22 Guénette R, Fortin M · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1995, 60: 27
- 23 Yuan X F, Ball R C, Edwards S F · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1993, 46: 331
- 24 Yuan X F, Ball R C, Edwards S F · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1994, 54: 423
- 25 Yuan X F, Ball R C · J Chem Phys, 1994, 101: 9016
- 26 Yuan X F, Edwards S F · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1995, 60: 335
- 27 Yuan X F, Doi M · Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects, 1998, 144: 305
- 28 Spenley N A, Yuan X F, Cates M E · J Phys II France, 1996, 6: 551
- 29 Espanol P, Yuan X F, Ball R C · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1996, 65: 93
- 30 Quinzai L M, Armstrong R C, Brown R A · J Non-Newtonian Fluid Mech, 1994, 52: 1
- 31 Baaijens H P W, Peters G W M, Baaijens F P T, Meijer H E H · J Rheol, 1995, 39: 1243
- 32 Barakos G, Mitsoulis E · J Rheol, 1995, 39: 1279

Dynamical Simulation of the Flow of Polymeric Complex Fluid

Zhao Delu, Li Xianfeng

(Polymer Physical Laboratory, Institute of Chemistry, The Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

Summary Numerical methods for the simulation of the flow of polymeric complex fluid has been reviewed in this paper. By comparison, the limitation of the classical finite element method and the advantage of the Lagrangian-Eulerian method have been pointed out. The rationality and flexibility of the Lagrangian-Eulerian method have been clarified by the consistency between the numerical results and the experimental observations.

Key words Polymeric complex fluid, Finite element method, Lagrangian-Eulerian method