

数值模拟法在聚物流变学教学中应用

张先明^{1*}, 傅雅琴¹, 冯连芳²

(1. 浙江理工大学, 先进纺织材料与制备技术教育部重点实验室, 杭州 310018;

2. 浙江大学化学工程国家重点实验室, 化学工程与生物工程学系, 杭州 310027)

摘要:聚物流变学多学科交叉特点致使其教学和科研均落后于高分子科学其它分支的发展。针对流变学教学过程中的诸多抽象概念和理论, 将计算流体力学(CFD)数值模拟的方法引入到教学中, 本文采用Weissenberg效应、二次流、挤出胀大和螺杆共混几个实例说明黏弹与牛顿流体本质差异, 并引导学生如何将流变学的原理和方法应用到工程设计实践中, 同时借用其工程设计应用功能来讲解经典流变学基本原理和理论。CFD数值模拟方法的引入使课程结构得到优化, 教学方法也更为直观生动, 提高学生学习的积极性。

关键词:聚物流变学; 计算流体力学; 本构方程; 教学

引言

聚物流变学是研究聚合物材料流动和变形的科学, 是联系聚合物凝聚态和制品性能的桥梁^[1]。理解聚合物材料的流变性能以及加工条件对其流变性能的影响, 对聚合物材料的配方、加工工艺和模具设计等具有重要意义。许多高校逐渐认识到聚物流变学的重要性, 逐渐在本科生中开设课程。本人自2009年在浙江理工大学开设聚物流变学课程, 并作为材料工程专业必修课, 在具体教学过程中, 逐渐认识到聚物流变学有别于其它高分子材料课程, 主要表现在: 聚物流变学的多学科交叉, 包括化学、材料科学、力学(主要是流体力学)和工程学等方面知识; 聚合物在观察时间范围内呈现出黏弹性, 其对外界的刺激相应不但依赖于外力的大小, 还依赖于外力作用的时间或频率, 因此其材料性能比较特殊, 进而导致本构方程比较复杂^[2]; 流变学测试设备多为进口, 价格昂贵, 造成实验课程开设比较困难。这些都给学生的学习带来了困难, 因此在理论课学习过程中兴致不高, 效果较差。在总结前人教学方法基础上^[3~7], 结合本人科研的研究经历, 逐步将计算流体力学(CFD)数值模拟方法应用到教学中去, 取得较好的效果, 在这里希望和大家交流和探讨。

1 数值模拟平台

CFD数值模拟方法是用计算机求解质量、动量和能量传递方程, 并结合聚合物黏弹本构方程来模拟加工过程形变和流动, 它已成为一种重要的科学研究方法, 并且被广泛地应用于聚合物加工的研究中^[8]。目前在聚物流变学教学过程中, 还着重于理论教学, 其真正的用途在并没有真正体现, 致使有些学生在学完课程后, 为什么建立材料本构方程还不清楚。为了激发学生兴趣, 首先要让其了解所学课程在以后工作或学习中用途, 了解各个章节是如何相互联系, 最后如何统一解决聚合物加工中的问题。如果只是在课堂泛泛而谈, 学生忘记所学内容也是迟早事情。

基于该目的, 结合本人在CFD数值模拟方面所做的科研工作, 逐渐将模拟技术融入到聚物流变学的教学之中。CFD数值模拟是在给定聚合物材料参数、加工设备参数及初始条件的情况下, 通过数值运算, 求出速度分布、压力分布和剪切速率分布等, 并以等高线图、彩色渲染图、曲线图、文本报告等形式展现出来。本人选用Polyflow软件作为工具, 其最大的优点是可以对黏弹流体进行数值求解, 其求解流程

收稿: 2013-01-11; 修回: 2013-03-08;

基金项目: 浙江理工大学省级实验教学示范中心实验教学改革项目;

* 通讯联系人: 张先明(1977—), 男, 博士, 副教授, 从事聚合物材料和流变学教学和研究, E-mail: joolizxm@hotmail.com.

与理论教学结合的流程如图 1 所示,下面分别举几个例子说明 CFD 数值模拟技术如何在理论教学中发挥作用。

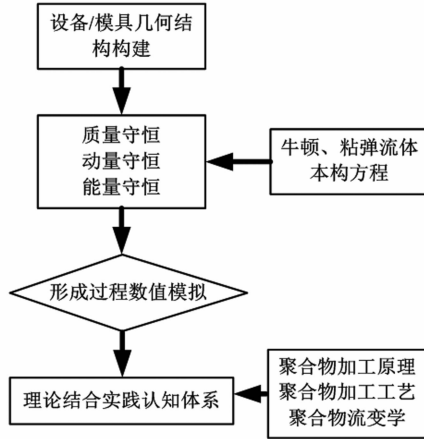


图 1 CFD 数值模拟与理论教学结合示意图

Figure 1 The combining representation between CFD numerical simulation and theory teaching

2 数值模拟实例

2.1 Weissenberg 效应

黏弹性流体在设备中流动的流场与牛顿流体有显著区别,其中最著名就是黏弹流体在搅拌作用下会发生爬杆现象,也称为 Weissenberg 效应。在平时理论教学过程中,只是阐明黏弹流体会发生爬杆现象,本构方程的作用根本没有体现。但在真正的工程设计中,本构方程是材料性能数值化的体现,因此可以通过对学生们演示本构方程改变,导致流场形态改变来引起学生学习的兴趣,数值模拟结果如图 2 所示。图 2b 显示了牛顿流体本构方程输入之后计算得到的流体在壁面上升,中心下降;图 2c 为采用 Giesekus 黏弹流体本构方程输入后形成的包轴现象。Giesekus 模型将总偏应力张量 T 分解为黏弹组分 T_1 和纯粘组分 T_2 ,方程如下式:

$$T = T_1 + T_2 \quad (1a)$$

$$\left(I + \frac{\alpha\lambda}{\eta_1} T_1\right) \cdot T_1 + \lambda \overset{\nabla}{T}_1 = 2\eta_1 D \quad (1b)$$

$$T_2 = 2\eta_2 D \quad (1c)$$

式中 α, λ, η_1 和 η_2 为物性参数, I 和 D 分别为单位张量和应变速率张量。采取黏弹本构方程还可以计算诸如转盘转速等与流体爬杆高度关系,而该问题解决在工程应用中非常重要,比如搅拌器设计不当,可能导致流体爬竿现象而不利于混合均匀。在反应釜中,本体聚合流体从牛顿流体转变为具有黏弹性的非牛顿流体,过程的传热和传质均发生明显变化,因此选择设备时需要充分考虑该反应过程的流变动力学过程。

2.2 二次流现象

在理论学习过程中,若能提供一个科研或工程应用中的实例引发学生的兴趣,则往往可获得较好的课堂教学效果,黏弹流体的二次流就是很好例子。黏弹流体在通过非圆形管道或连续扭转的圆形管道时,在主要的纯轴向流动上,附加出现局部区域性的环流,称为二次流。二次流动相对于主流动虽然在数量级上比较小,但对物质的运输、热交换和壁面摩擦,以及流动结构等方面的影响却不容忽视。图 3 给出黏弹性流体通过矩形流动时形成的二次流,产生的主要原因是第二法向应力差^[9],采用数值模拟不但可以直观地了解黏弹聚合物材料在矩形流道内的流动过程,利用软件的后处理功能,还能对变形过程中的应力场、应变场和温度场等进行定量分析。

2.3 挤出胀大

在工科院校中,聚物流变学的教学应着重于教会同学们如何应用流变学原理以及影响因素分析解

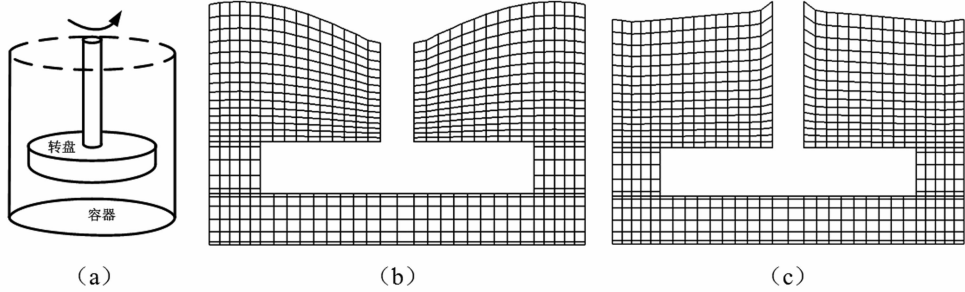


图 2 Weissenberg 效应
(a)模型;(b)牛顿流体;(c)黏弹流体

Figure 2 Weissenberg effect
(a) rotating disc; (b) Newtonian fluid; (c) viscoelastic fluid

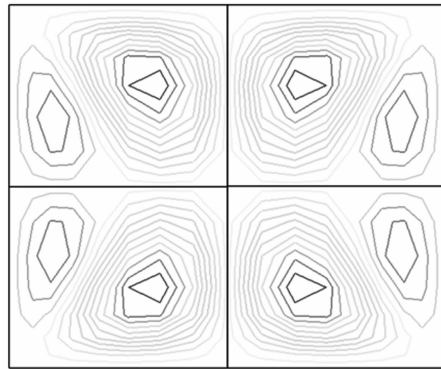


图 3 矩形管道二次流现象
Figure 3 Secondary motion of viscoelastic fluid in straight rectangular channel

决问题。当聚合物熔体从口模挤出时,在未受到足够的牵引拉伸作用下,挤出物的横截面积会大于口模出口的横截面积,这一现象称作挤出胀大。挤出胀大是黏弹流体(包括高分子溶液和熔体)共有的特性,通常与聚合物物性、生产工艺、口模构型和挤出设备等影响因素有关。

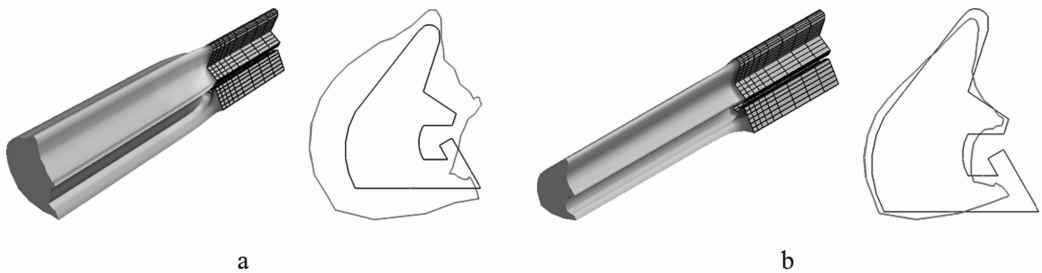


图 4 黏弹流体(a)和牛顿流体(b)挤出胀大模拟图

Figure 4 The comparison between die lips and extrudate shape for viscoelastic fluid (a) and a generalized Newtonian fluid (b)

在聚合物理理论教学过程中,一般会介绍黏弹流体和牛顿流体在挤出后,挤出物截面会有所不同,但是很难做到定量分析,而且各加工因素的影响不很明确。考虑到这个问题,本人以汽车密封条的口模挤出为例,分别计算了黏弹流体和广义牛顿流体在挤出后,挤出物截面的差异,结果如图 4 所示,可以看出黏弹流体有明显的胀大现象,而广义牛顿流体不但没有胀大,反而有缩小现象,但两挤出物截面形状都与模具设计的口模形状有很大差异。通过这个计算演示,同学们可以直观感受到聚合物流变学在挤出模具设计中的重要性,理解挤出胀大很大程度上决定挤出制品的尺寸和质量。同时还可以计算出不同流量、材料和口模形状等因素对胀大比的影响。数值模拟结果很有新意,学生也很感兴趣。

2.4 双螺杆中捏合元件混合模拟

由于聚合物熔体的高粘性导致雷诺数较低,因此聚合物共混复合主要通过层流混合来完成。在流变学理论教学过程中,都会重点讲述层流流动状态下的压力流和拖曳流,分别借用管道流动和狭缝流动(上板运动,下板静止)来介绍压力流和拖曳流,并且分别给出速度和压力的解析解。由于毛细管流变仪是基于压力流机理开发的,旋转流变仪则是基于拖曳流的机理开发的,因此它也是讲解流变测量学的基础。但是在加工设备中的流场都是这两种流动的组合,比如单螺杆和双螺杆挤出机。由于不了解组合方式,学生就会产生疑问:两流动都是同方向促进流动? 还是一个促进,一个阻碍流动,到底哪个促进哪个阻碍? 这时采用对螺杆元件的数值模拟结合理论分析则可以加深学生直观印象,同时让学生带着问题学习也会促进学习的效率,加深理解。图5给出通过流变实验得到聚苯乙烯材料粘度数据,然后利用 Carreau 本构方程拟合实验结果,得到表征材料粘度的参数,结合捏合元件的模型和流体力学方程,求解聚苯乙烯熔体在挤出机捏合元件中的流动形态。同时还可以给出压力分布、粘度分布和剪切速率分布等动画演示,结合这些图形和动画,可以让学生很好了解压力流和拖曳流的如何组合来输送流体,同时对双螺杆挤出机瞬态工作特性有很好认识,为以后的聚合物加工原理和加工工艺的学习奠定基础。

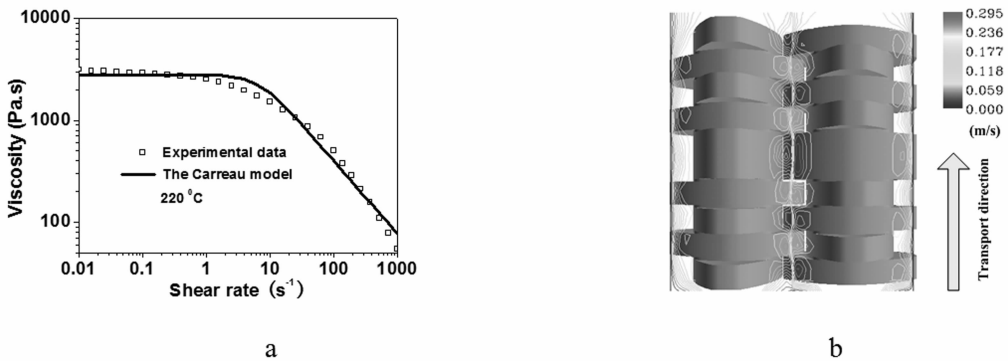


图5 实验数据的本构方程拟合(a)和流场分布图(b)

Figure 5 (a) Experimental data of the shear viscosity and its fitting curve by Carreau model; (b) velocity profile

3 总结

CFD 数值模拟技术的引入对学生理解聚物流变学中的本构方程、牛顿流体和黏弹流体区别、输送过程的基本方程等知识点理解有非常直接的帮助,无疑可以取到事半功倍的效果,由于模拟过程中涉及的知识点都是流变学中最基本、最重要的问题比如二次流、Weissenberg 效应、挤出胀大等问题,也是其课程学习的重点、难点问题,因此可起到纯粹课堂教学不可能达到的效果。面向真正的工程的研究性学习有助于培养学生的学习兴趣,也为培养既具有扎实的基础,又懂技术的研究型人才奠定基础。

参考文献:

- [1] 何平笙,杨海洋,朱平平. 化学通报,2010,(1):88~92.
- [2] 郑强,林宇,叶一兰,张小虎,上官勇刚,左敏. 高分子通报,2010,(6):99~105.
- [3] 郝文涛,王小明,杨文. 高分子通报,2012,(1):108~112.
- [4] 廖华勇. 高分子通报,2012,(6):98~101.
- [5] 申长雨,关绍康,张锐. 中国大学教学,2008,(3):52~54.
- [6] 赵丽芬,刘欣. 高分子通报,2012,(12):88~90.
- [7] 朱平平,何平笙,杨海洋,梁好均. 大学化学,2010,25(4):41~46.
- [8] Zhang X M, Feng L F, Chen W X, Hu G H. Polym Eng Sci, 2009, 49 (9):1772~1783.
- [9] Yue P, Dooley J, Feng J J. J Rheol, 2008, 52 (1):315~332.

Application of Numerical Simulation Method in Polymer Rheology Teaching

ZHANG Xian-ming^{1*}, FU Ya-qin¹, FENG Lian-fang²

(1. *Key Laboratory of Advanced Textile Materials and Manufacturing Technology, Ministry of Education, Zhejiang Sci-Tech University, Hangzhou 310018, China;*

2. *State Key Laboratory of Chemical Engineering, Department of Chemical and Biochemical Engineering, Zhejiang University, Hangzhou 310027, China*)

Abstract: The teaching and research of polymer rheology fall behind those of other fields of polymer science because of the interdisciplinary characterization of polymer rheology. The numerical simulation based on computational fluid dynamics (CFD) was introduced to the course in order to improve the comprehension of students for basic concepts of polymer rheology and motivate students' interest in learning. Several corresponding examples such as Weissenberg effect, secondary flow, die swell and screw mixing are provided to investigate the essential difference between the viscoelastic fluid and Newtonian fluid, and guide the students how to use polymer rheology in the engineering designs. Meanwhile, the applied function of engineering designs for polymer rheology is used to explain the fundamental principles of polymer rheology. Therefore, the method is favorable to optimizing curriculum structures and improving the quality of teaching.

Key words: Polymer rheology; CFD; Constitutive equation; Teaching