

拉格朗日-欧拉方法模拟高分子复杂流体平面收缩流动*

李 险 峰

(中国科学院化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室 北京 100080)

袁 学 锋

(Department of Mechanical Engineering, King's College London, University of London, UK)

步 怀 天 赵 得 禄

(中国科学院化学研究所高分子物理与化学国家重点实验室 北京 100080)

摘 要 为验证拉格朗日-欧拉方法的准确性,对高分子溶液的4:1平面收缩流动问题进行了数值模拟,采用单松弛时间的Phan Thien-Tanner本构方程,得到PIB/C14溶液在 $De = 3.0$ 的收缩流动的计算结果,同Quinzani等所做的收缩流动实验中的稳态流场物理量的测量结果进行了比较,在定量上取得较好的一致性.证明拉格朗日-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,在描述真实的物理过程时是合理、准确的.

关键词 拉格朗日-欧拉方法,平面收缩流动

所谓复杂流体是指含有超分子体(如高分子、胶体颗粒、胶束和分子膜等)的多组分液体物质,其行为取决于所含超分子体的结构及聚集形态.高分子流体是复杂流体科学的主要研究对象之一.近年来,现代试验技术和高性能计算机的广泛应用极大地加深了人们对高分子科学的认识;而一批物理学家和数学家涉足这一领域,更为高分子科学从描述性的定性学科发展成为具有相当数理基础的定量学科奠定了基础,使得对聚合物材料的研究逐步成为以高分子化学、现代统计物理学、材料工程与科学和数值模拟计算等多学科为基础的一门边缘学科.而从分子水平上认识和预报高分子流体在复杂边界条件下的流场正是这一新兴学科中富于挑战性的课题.要解决这个问题就要首先解决两大障碍:其一是物理问题;即对于指定的高分子流体,如何从分子运动的机理出发来构造它的应力-应变本构关系;其二是数学问题,即对于给定的本构方程和流场边界条件如何求出非线性偏微分流体力学控制方程组的物理解.成功地解决这两大问题就相当于在微观分子结构、宏观流变性质、流场以及以后成型的高分子材料之间建立起了桥梁.这对于在分子水平上设计高分子材料,优化工艺参数和模具结构,甚至实现高分子合成、材料加工和产品质量的全面控制

具有战略意义.

在对高分子流体的行为进行理论模拟研究中,我们使用的是拉格朗日-欧拉方法^[1,2].从目前该方法对一些具有代表性的物理问题的定性研究中可见,它既可以模拟稳态的流动^[1,3,4],也可以模拟动态的流动过程^[2,3,5];既可以模拟高分子熔体或溶液这一类可由各种形式的本构方程描述的流体的流动,也可以模拟固体悬浮液^[6]、泡沫^[7]或乳液^[2]等一些不能用具体的本构方程描述的流体的流动.其解决问题的合理性以及其应用涉及范围的广泛性,表明这是一种非常灵活和普适的方法,具有非常大的潜在应用价值.本文将针对研究高粘弹性流体流动的标准问题之一^[8]即4:1的平面收缩流动,通过将模拟结果同相关的实验结果进行对比,进一步证明该方法在物理上的可靠性.

1 对高分子复杂流体流动问题的数学描述

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;每一流动单元在流场中所受的应力是整个应变历史的衰减记忆函数;其运动方程是非线性、非局部的;在大多数条件下,其惯性效应很小,雷诺数可以忽略,基本

*1999-04-19 收稿,1999-10-08 修稿;国家自然科学基金重点项目(基金号 29634030)、国家重点基础研究专项经费资助(G1999064800)

上表现为蠕动流. 根据以上特点, 控制高分子流体流动的流体力学方程可表达如下.

对于不可压缩绝热的粘弹流体, 为满足不可压缩条件和动量守恒, 其控制方程为:

$$\nabla \cdot v = 0 \tag{1}$$

$$\rho \frac{Dv}{Dt} = \nabla \cdot \sigma(t) - \nabla p \tag{2}$$

这里, v 为速度矢量, ρ 为流体的密度, p 为各向同性的压力, D/Dt 为随体导数, $\sigma(t)$ 为 Cauchy 应力张量, 可以分解为:

$$\sigma(t) = \tau_N + \tau_v(t) \tag{3}$$

其中的 τ_N 和 τ_v 分别为纯粘性牛顿应力和附加粘弹应力, 前者可表示为:

$$\tau_N = 2\eta_N D \tag{4}$$

η_N 为牛顿粘度, D 为应变率张量, 它是速度梯度 (∇v) 及其转置矩阵 (∇v^T) 的线性组合:

$$D = \frac{1}{2}(\nabla v + \nabla v^T) \tag{5}$$

(3)式中附加粘弹应力张量 τ_v 可根据具体的本构方程来计算. 在本文的计算中我们要用到的是单松弛时间的微分型 Phan Thien-Tanner 方程.

该类型本构方程较为常用的形式为:

$$A(\tau_v, \lambda) \cdot \tau_v + \lambda \frac{\delta \tau_v}{\delta t} = 2\eta_v D \tag{6}$$

式中, τ_v 和 D 的含义同上. $A(\tau_v, \lambda)$ 是与具体流动模型相关的张量矩阵, λ 为松弛时间, η_v 为粘度系数 ($\eta_v = G\lambda$, G 为弹性模量). $\delta \tau_v / \delta t$ 为 τ_v 的时间导数, 是 τ_v 变化率的线性组合:

$$\frac{\delta \tau_v}{\delta t} = a\tau_v^{(1)} + (1 - a)\tau_{v(1)} \quad (0 \leq a \leq 1) \tag{7}$$

其中, a 为无量纲参数, $\tau_{v(1)}$ 和 $\tau_v^{(1)}$ 分别为附加粘弹应力的上、下协变导数:

$$\tau_{v(1)} = \frac{D\tau_v}{Dt} - \tau_v \cdot \nabla v - \nabla v^T \cdot \tau_v \tag{8}$$

$$\tau_v^{(1)} = \frac{D\tau_v}{Dt} + \tau_v \cdot \nabla v^T + \nabla v \cdot \tau_v \tag{9}$$

式(6)中的模型张量有以下两种定义形式:

PTT-a: $A(\tau_v, \lambda) = \exp\left[\frac{\epsilon \lambda}{\eta_v} \text{tr}(\tau_v)\right] I \tag{10}$

PTT-b: $A(\tau_v, \lambda) = \left[1 + \frac{\epsilon \lambda}{\eta_v} \text{tr}(\tau_v)\right] I \tag{11}$

其中, $\text{tr}(\tau_v)$ 是 τ_v 的迹, I 为单位张量, ϵ 为材料常数, $0 < \epsilon < 2$.

给定边界条件, 用流体力学控制方程和本构

方程能够组成封闭的方程组来描述某一具体的流动行为. 但在通常条件下, 这是一组椭圆-双曲混合型的非线性偏微分方程, 目前还无法在数学上精确求解, 只能通过数值模拟的手段得到其合理的近似解. 拉格朗日-欧拉方法在求解时, 速度和压力场是在欧拉步骤中通过对流动单元进行逐点迭代求得 (每个单元都要严格满足不可压缩条件 (1) 式和动量守恒条件 (2) 式); 应力场是在拉格朗日步骤中根据所记录的流动单元的应变历史和本构关系 ((6) 式) 而求得. 该方法中的网格生成原理和差分格式在文献 [1, 2] 中有详尽描述.

2 结果与讨论

在对聚异丁烯/十四烷溶液 (PIB/C14) 的 4:1 平面收缩流动的模拟中, 对流场中的固壁采用无滑移边界条件; 在上游入口处和下游出口处均采用周期边界条件, 并忽略流体的惯性.

PIB/C14 的 4:1 平面收缩流动的实验测量结果是由 Quinzani 等给出的 [9]. 他们利用激光多普勒测速仪 (LDV) 和流动双折射技术 (FIB) 得到了在 Deborah (De) 数从 0.4 到 4.15 范围内流场中各个位置的速度和应力的分布 (图 1 所示).

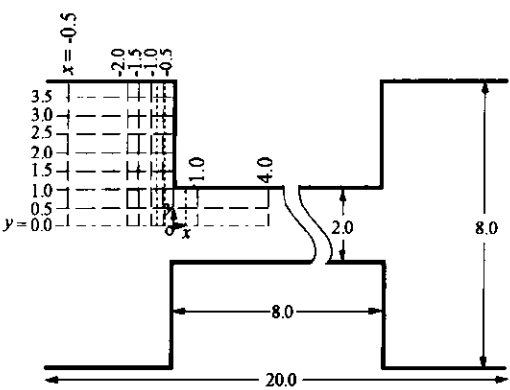


Fig. 1 Flow geometry; measure positions of velocity and stress distribution (---); measure positions of stress distribution(.....)

其中, De 的定义如下:

$$De = \frac{\lambda < U >}{h} \tag{12}$$

这里, $< U >$ 为平均流速, h 为下游管道的宽度. 以下给出在计算中将用到的一些材料参数.

原则上, 要精确模拟 Quinzani 等的实验结果, 需要根据他们对 PIB/C14 体系的流变测量结果, 采取多松弛时间模式的本构方程进行计算, 这

需要大量的计算时间. Azaiez 等曾用有限元方法结合单松弛时间的 Giesekus, FENE-P 和 PTT-b 型本构方程对此实验进行了模拟^[10], 其结果至少在定性上与实验结果相一致, 并且某些结果在定量上与实验相当吻合. 这里, 为减小计算量并不失模拟的合理性, 我们也采用单松弛时间 PPT-a 型本构方程. 取流体的零切粘度 $\eta_0 = \eta_N + \eta_v = 1.424 \text{ Pa} \cdot \text{S}$, 且 $\eta_N/\eta_0 = 0.05$; 松弛时间 $\lambda = 0.025 \text{ s}$; 材料常数 $\epsilon = 0.3, \alpha = 0$. 图 2 是根据以上条件得到的流体的剪切粘度 η_s 和第一法向应力系数 ψ_1 随剪切速率的变化情况. 在全部剪切速率变化范围内, η_s 和 ψ_1 的变化与文献[9]和[10]相一致, 说明这里选择的模型参数是合理的.

拉格朗日-欧拉方法是一种动态方法, 在迭代进行到一定步聚后, 流场中各物理量将趋于平衡值. 图3给出了 De 随迭代进程的变化情况 (t 为

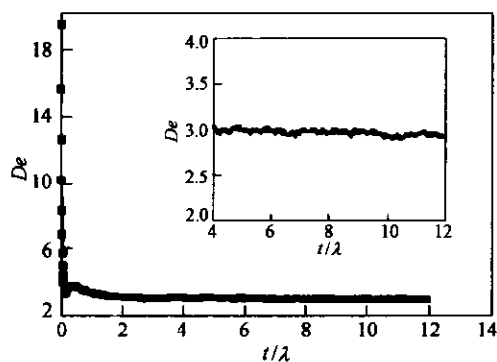


Fig. 3 Deborah number (De) versus t/λ

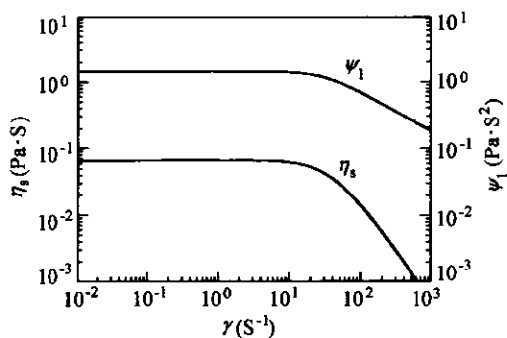


Fig. 2 Shear viscosity (η_s) and first normal stress coefficient (ψ_1) versus shear rate(γ)

物理时间, 时间步长为 0.01), 其稳态平均值约为 3.0. 图 4 为稳态流动下 $t/\lambda = 12$ 时刻在流场内的奇异点附近第一法向应力差的分布情况. 图 5 为此时刻流动单元在流场中的分布.

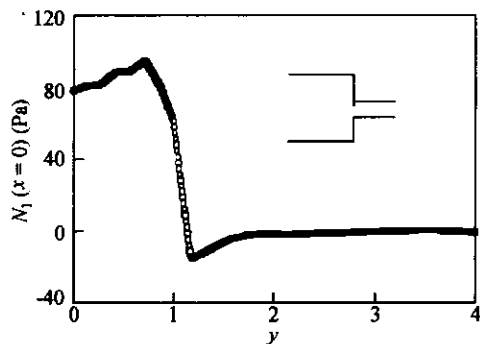


Fig. 4 First normal stress difference distribution near singular point in steady flow field

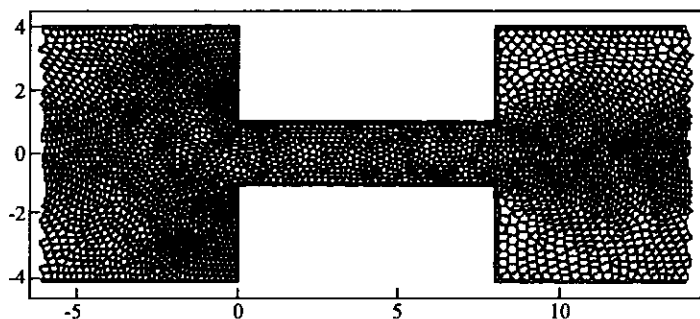


Fig. 5 4:1 planar abrupt contraction flow geometry($De = 3.0, t/\lambda = 12$, 3570 Voronoi elements)

图 6 给出在流场内的不同位置, 计算得到的水平速度分量(u)在上游沿 x, y 方向的分布(图 6a, 6b)以及在下游沿 y 方向的分布(图 6c). 总之, 速度分布的模拟结果与实验较为符合. 图 6c

与实验结果正好相反, 下游 u 的分布在 $x = 4.0$ 处的值要低于 $x = 0.0$ 和 1.0 处的, Azaiez 等的模拟也是如此^[10]. 这表明在模拟得到的流场中, u 在收缩入口处很小的一个范围内有

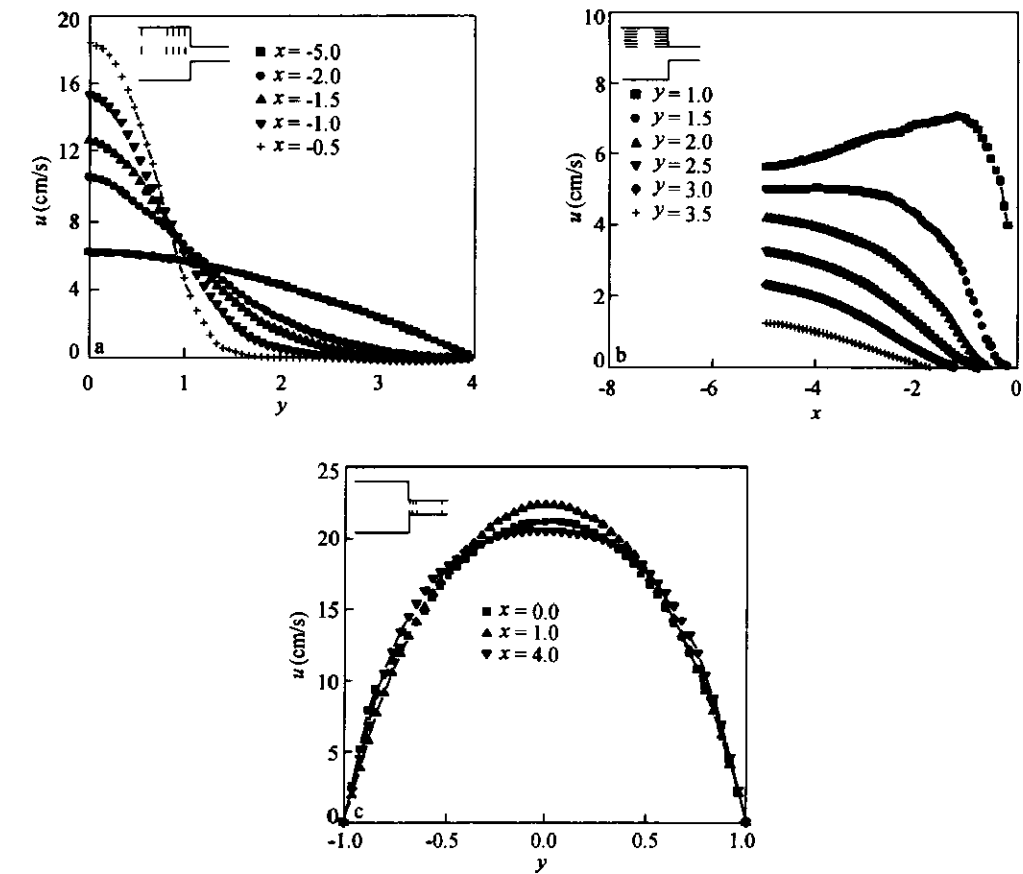


Fig. 6 Velocity vector distribution at $De = 3.0$

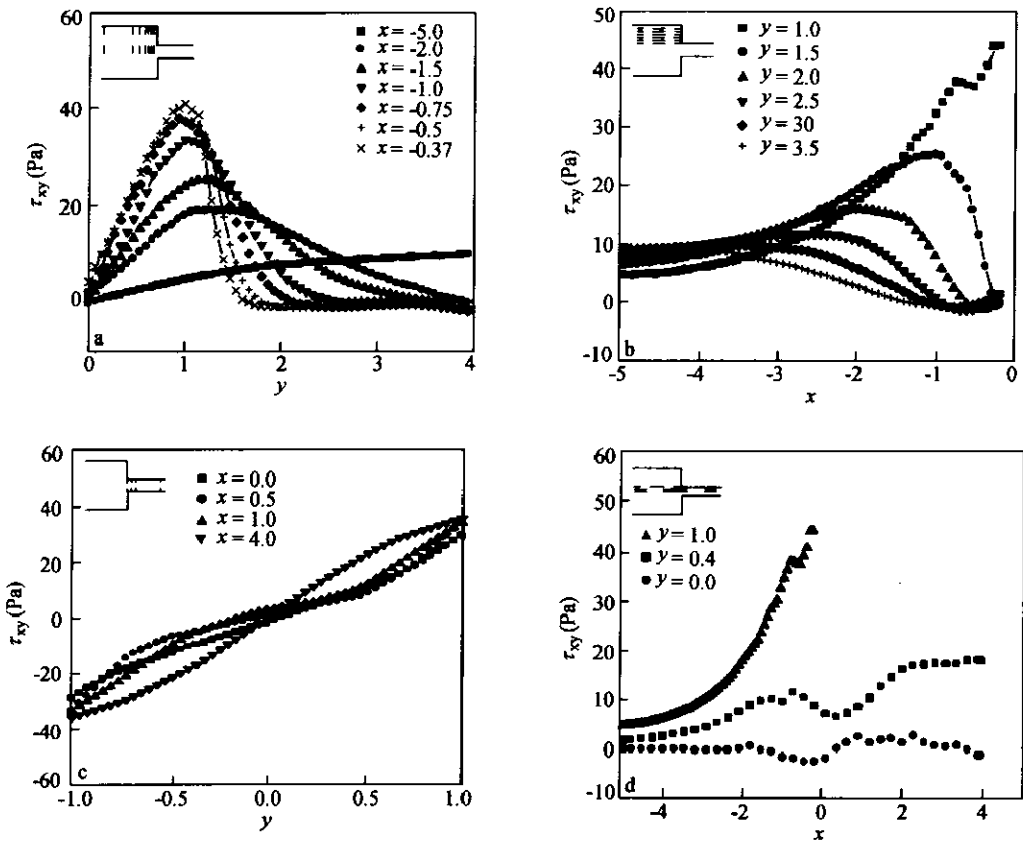


Fig. 7 Shear stress ($-\tau_{xy}$) distribution at $De = 3.0$

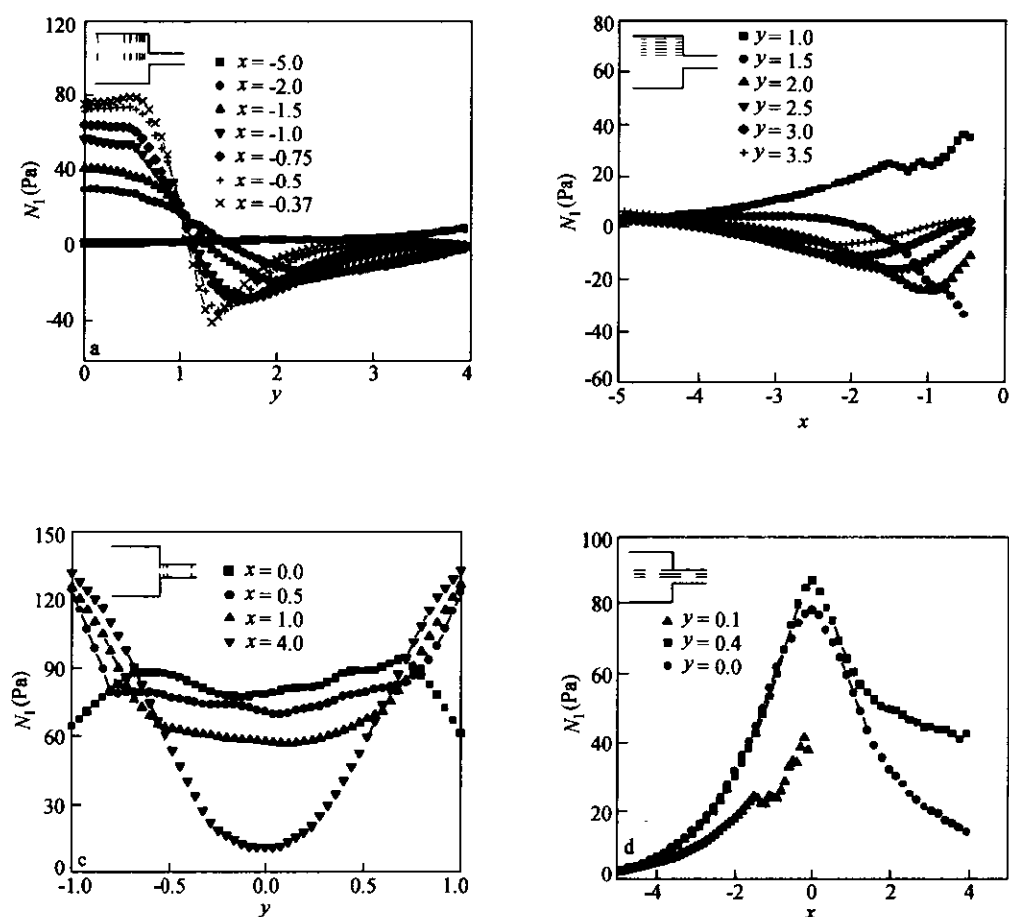


Fig. 8 First normal stress difference ($N_1 = \tau_{xx} - \tau_{yy}$) distribution at $De = 3.0$

明显增加,高于下游的平均流速。

图 7 给出在流场内的不同位置,剪切应力 (τ_{xy})在上游沿 x 、 y 方向的分布(图 7a、7b)以及下游沿 x 、 y 方向的分布(图 7c、7d)。第一法向应力差(N_1)在相应位置的分布由图 8(a)~(d)给出。对应力的模拟结果同实验测量值相比,第一法向应力差的分布与实验较为接近,但剪切应力的值略低于实验结果。

3 结论

我们的模拟结果与 Quinzani 的是收缩流动实验结果在定量上取得良好的一致性,表明拉格朗日-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,在描述真实的物理过程时是准确的。

REFERENCES

- 1 Yuan X F, Ball R C, Edwards S F. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1993, 46: 331~350
- 2 Yuan X F, Doi M. *Physicochemical and Engineering Aspects*, 1998, 144: 305
- 3 Li Xianfeng (李险峰), Yuan Xuefeng (袁学锋), Zhao Delu (赵得禄). *Acta Polymerica Sinica (高分子学报)*, 2000, (3): 280~286
- 4 Li Xianfeng (李险峰), Yuan Xuefeng (袁学锋), Zhao Delu (赵得禄). *Acta Polymerica Sinica (高分子学报)*, in press
- 5 Yuan X F, Ball R C, Edwards S F. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1994, 54: 423~435
- 6 Yuan X F, Ball R C. *J Chem Phys*, 1994, 101: 9016~9021
- 7 Yuan X F, Edwards S F. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1995, 60: 335~348
- 8 Brown R A, McKinley G H. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1994, 52: 407~413
- 9 Quinzani L M, Armstrong R C, Brown R A. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1994, 52: 1~36
- 10 Azaiez J, Guénette R, Ait-Kadi A. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1996, 62: 253~277

THE LAGRANGIAN-EULERIAN METHOD: SOLUTIONS FOR PLANAR CONTRACTION FLOW

LI Xianfeng

(*State Key Laboratory of Polymer Physics and Chemistry, Center for Molecular Science,
Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080*)

YUAN Xuefeng

(*Department of Mechanical Engineering, King's College London, University of London, UK*)

BU Huaitian, ZHAO Delu

(*State Key Laboratory of Polymer Physics and Chemistry, Center for Molecular Science,
Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080*)

Abstract The accuracy and robustness of Lagrangian-Eulerian method on benchmark problem of viscoelastic flow through complex geometries was tested. The test is performed by directly comparing the numerical predictions of flow through a 4:1 planar contraction with the experimental observations in order to ensure whether the method is physically correct. The one-mode Phan-Thien and Tanner (PTT) constitutive model is used in the present calculation. Profiles of both velocity and stresses are obtained at different sections of the steady flow, and compared with laser Doppler velocimetry and flow-induced birefringence data given by Quinzani *et al.* for a polyisobutylene/tetradecane(PIB/C14) contraction flow at a Deborah number $De = 3.0$. Overall, the simulation has reproduced the experimental results with good accuracy, the agreement between the numerical predictions and the experimental reports is fairly well.

Key words Lagrangian-Eulerian method, Planar contraction flow