

拉格朗日-欧拉方法模拟高分子复杂流体平面绕流*

李险峰¹ 袁学锋² 步怀天¹ 赵得禄¹

(¹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)

(²Department of Mechanical Engineering, King's College London, University of London, UK)

摘 要 为验证拉格朗日-欧拉方法的准确性,对高分子溶液的2:1绕圆柱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 $De = 0.93$ 的绕流计算结果,同Baaijens等所做的绕流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, 平面绕流

高分子流体是复杂流体科学的主要研究对象之一,近来随着激光 Doppler 测速(LDV)和流动双折射(FIB)技术广泛应用于研究聚物流体的流动,可以得到流场内的应力、速度等分布的详细资料,为数值模拟技术提供了大量的题材。粘弹性流体绕圆柱的稳态流动被约定为流体力学的标准问题,可以通过比较不同算法对该问题的计算结果来考察算法的准确性,另外,各种算法在物理上的合理性和准确性也可以从对该问题的实验的模拟中得到确认。本文用拉格朗日-欧拉方法^[1,2]对聚异丁烯(5.0wt%)/十四烷(PIB/C14)溶液平面绕流进行了模拟,将模拟的结果与Baaijens^[3,4]等用LDV和FIB测量所得实验结果对比,来验证该方法的合理性和准确性。

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,基本上表现为蠕虫流。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:

$$\nabla \cdot v = 0 \quad (1)$$

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

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:

$$\sigma(t) = \tau_N + \tau_V(t) \quad (3)$$

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:

$$\tau_N = 2\eta_N D \quad (4)$$

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:

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

(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:

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

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($\eta_V = G\lambda$, 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:

*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)

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

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:

$$\tau_{V(1)} = \frac{D\tau_V}{Dt} - \tau_V \cdot \nabla V - \nabla V^T \cdot \tau_V \quad (8)$$

$$\tau_V^{(1)} = \frac{D\tau_V}{Dt} + \tau_V \cdot \nabla V^T + \nabla V \cdot \tau_V \quad (9)$$

式(6)中的模型张量有以下两种定义形式:

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

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

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

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[5,6]中有详尽描述.

2 结果与讨论

在对平面绕流问题的模拟中,对流场中的固壁采用无滑移边界条件;在上游入口($X = -6R$)处和下游出口($X = 6R$)处均采用周期边界条件,并忽略流体的惯性.

PIB/C14 溶液平面绕流流场的实验测量结果由 Baaijens 等给出^[3,4].他们利用 LDV 和 FIB 测量技术得到了 $De = 0.25 \sim 2.32$ 范围内流场中各

个位置的速度和应力的分布(图1).这里, De 的定义为:

$$De = \frac{\lambda \langle U \rangle}{R} \quad (12)$$

R 为流场内受限圆柱的半径, R 与流场半高宽之比为 1:2.

在圆柱绕流问题中,另一个令人感兴趣的物理量是作用在单位长度圆柱上的阻力(F).对二维问题, F 可通过对作用在圆周上的应力积分而求得:

$$F = \int_0^{2\pi R} n \cdot \sigma dl = \int_0^{2\pi R} n \cdot (\tau_N + \tau_V - pI) dl \quad (13)$$

其中, n 是垂直于圆周的外法向量,应力张量 $\sigma = \tau_V + \tau_N - pI$, I 为单位张量.阻力系数 χ 定义为:

$$\chi = \frac{F}{4\pi \eta_0 \langle U \rangle} \quad (14)$$

对该实验结果, Baaijens 等曾用有限元方法结合单松弛时间及多松弛时间的 PTT-b 型本构方程做了模拟^[3,4],模拟的结果与实验相当一致.另外, Barakos 和 Mitsoulis^[7](多松弛时间 K-BKZ), Dou 和 Phan-Thien^[8](单松弛时间 PTT-b)也分别用各自的方法对此进行了模拟,并得到很好的结果.这里,为验证拉格朗日-欧拉方法,我们亦采用单松弛时间的 PTT-b 方程,并选取与 Baaijens 等的工作中完全相同的模型参数来进行计算.

根据文献[4],取流体的零切粘度 $\eta_0 = \eta_N + \eta_V = 0.928 \text{ Pa}\cdot\text{s}$, 且 $\eta_N/\eta_0 = 0.0539$; 松弛时间 $\lambda = 0.029 \text{ s}$; 材料常数 $\epsilon = 0.39$, $a = 0$.图2是根据以上条件,用 PTT-b 方程得到的剪切粘度(η_s)、第一法向应力差 N_1 随剪切速率(γ)的变化以及拉伸粘度(η_E)拉伸速率(ϵ)的变化情况.

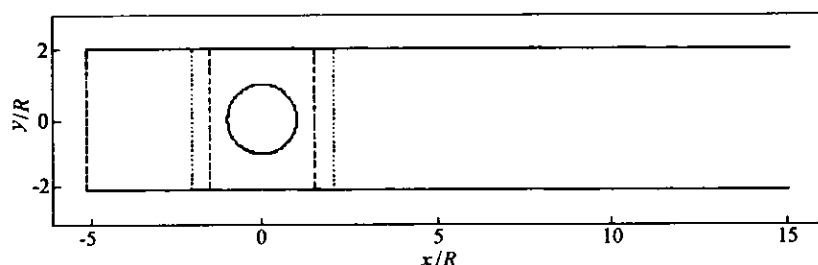


Fig. 1 Flow geometry, measure positions of velocity and shear stress (---, $X_k = x/R = -5$, ± 1.5); measure positions of velocity, shear stress and first normal stress difference (···, $X_k = x/R = \pm 2$)

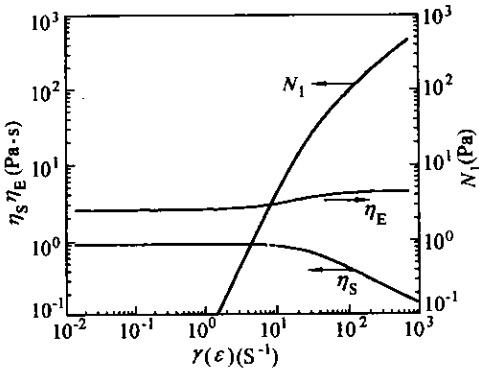


Fig. 2 Shear viscosity (η_s) and first normal stress difference (N_1) vs shear rate (γ); stretching viscosity (η_E) versus stretching rate (ϵ)

2.1 速度场和应力场的稳态结果

图 3、4 分别给出了在不同压力梯度下 De 的阻力系数 χ 随迭代进程的变化情况(时间步长均为 0.01). 以下,我们以 $De=0.93$ 为例,将模拟结果同实验结果进行具体的比较.

图 5 为 $De=0.93, t/\lambda=19.0$ 时刻流动单元在流场中的分布. 图 6(a)~(c)分别给出与实验对应的速度、第一法向应力差及剪切应力的模拟结果. 流场中轴线上速度和第一法向应力差分布的模拟结果由图 7(a)和(b)给出. 图中全部物理

量均经过约化,同文献[7]一致,长度用 R 约化,速度用 $\langle U \rangle$ 约化,应力用参考应力 τ_0 约化, τ_0 的表达式为:

$$\tau_0 = \frac{3\eta_0\langle U \rangle}{R} \tag{15}$$

图 6 中,为给出物理量平滑分布曲线,我们用 5 个连续的稳态结果进行了统计平均. 通过将图 6 和图 7 中的结果同 Baaijens 等的工作对比可见,在流场内各个位置,本计算得到的速度分量($u/\langle U \rangle$)、第一法向应力差(N_1/τ_0)以及剪切应力(τ_{xy}/τ_0)与其 PTT-b 模型的计算结果以及实验结果都非常符合.

2.2 圆柱受力分析

虽然 Baaijens 等没有给出有关流体作用在圆柱上的阻力(F)的实验或计算结果,但在其后一些对该实验的模拟工作中^[7,8],一般都讨论了 F 随 De 的变化情况. 这样做的目的有两个,一是用来评价计算中所用网格收敛性的好坏,二是用来评价不同的算法或本构方程在该结果上的差异.

按(14)式求得的阻力系数 χ 随 De 变化情况由图 8 给出. 其中也给出 Dou 和 Phan-Thien^[8](网格 M3)的计算结果. 可见 χ 随 De 的增加而单调下降;同 Dou 和 Phan-Thien 的结果相比,我

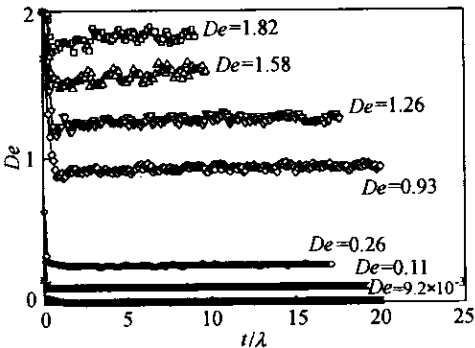


Fig. 3 Deborah number (De) versus t/λ

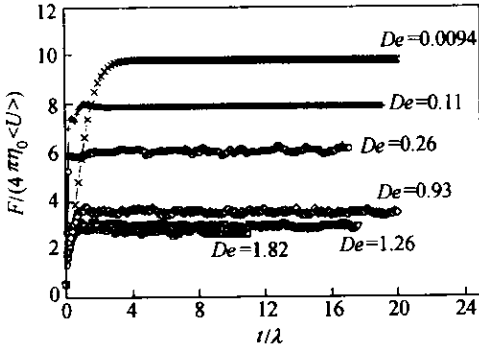


Fig. 4 Drag coefficient (χ) versus t/λ

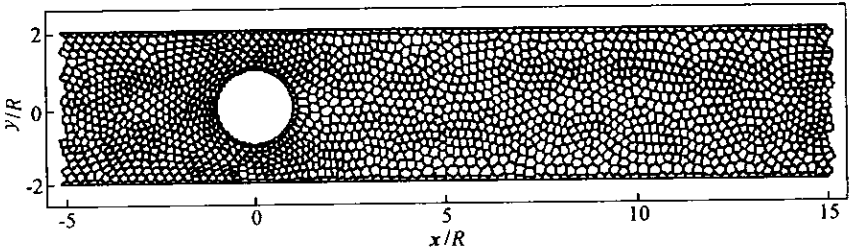


Fig. 5 Flow past a confined cylinder in a planar channel with 2:1 diameter/wall ratio
 $De=0.93, t/\lambda=19.0$; 1816 Voronoi elements totally, 43 elements around cylinder

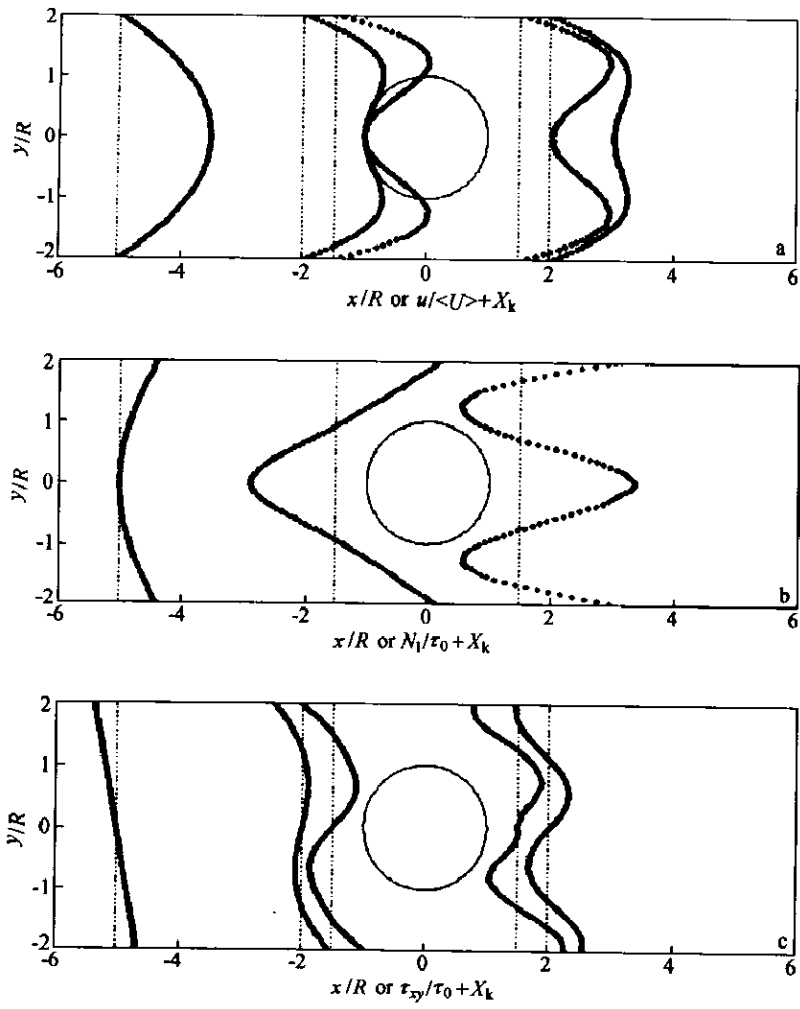


Fig. 6 Simulation results at $De = 0.93$

- a) Velocity distribution
- b) First normal stress difference distribution
- c) Shear stress distribution

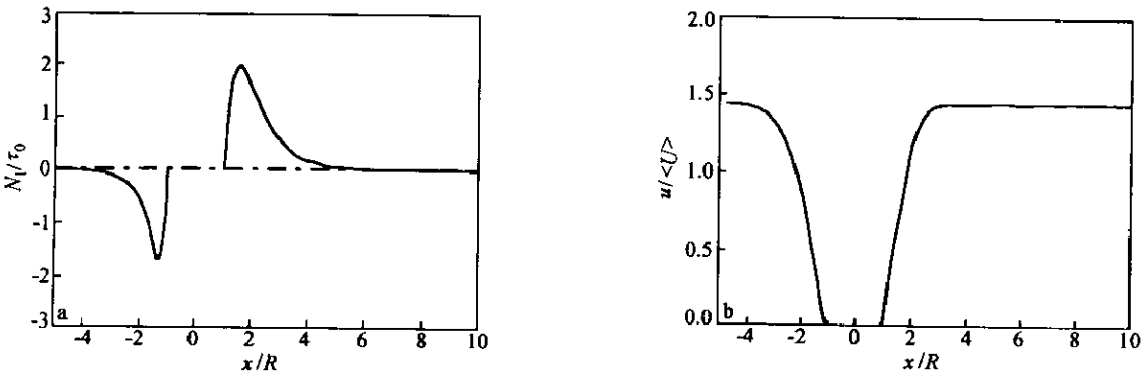


Fig. 7 Simulation results at $De = 0.93$

- a) First normal stress difference distribution along the symmetry line ($y = 0$)
- b) Viscosity distribution along the symmetry line ($y = 0$)

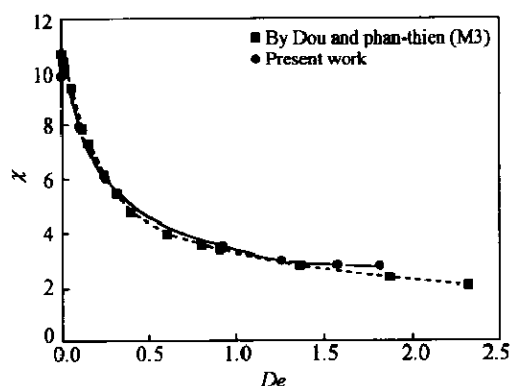


Fig. 8 Effect of Deborah number on the drag coefficient (χ)

们的结果略有误差.这和使用的网格的精度有关.这里我们所用的网格包括 1816 个 Voronoi 单元, 3640 个三角形单元,绕圆柱有 43 个单元.而 Dou 和 Phan-Thien 所用的网格更为精细, M3 共含 9516 个三角形单元,绕圆柱有 556 个单元.然而,从节省机时的角度(每步迭代需要约 40 秒 CPU 时间)和对 $De = 0.93$ 的模拟结果来看,本文所选择的网格密度还是合理的.

REFERENCES

- 1 Li Xianfeng(李险峰), Zhao Delu(赵得禄). *Acta Polymerica Sinica*(高分子学报), 2000, (3): 280~286
- 2 Li Xianfeng(李险峰), Yuan Xuefeng(袁学峰), Bu Huaitian(步怀天), Zhao Delu(赵得禄), *Acta Polymerica Sinica*(高分子学报), 2000, (4): 432~437
- 3 Baaijens F P T, Baaijens H P W, Peters G W M, Meijer H E H. *J Rheol*, 1994, 38: 351~367
- 4 Baaijens H P W, Peters G W M, Baaijens F P T, Meijer H E H. *J Rheol*, 1995, 39: 1243~1277
- 5 Yuan X F, Ball R C, Edwards S F. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1993, 46: 331~350
- 6 Yuan X F, Doi M. *Physicochemical and Engineering Aspects*, 1998, 144: 305
- 7 Barakos G, Mitsoulis E. *J Rheol*, 1995, 39: 1279~1292
- 8 Dou H S, Phan-Thien N. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1998, 77: 21~51

THE LAGRANGIAN-EULERIAN METHOD: SOLUTIONS FOR FLOW AROUND A CYLINDER IN A PLANAR CHANNEL

LI Xianfeng¹, YUAN Xuefeng², BU Huaitian¹, ZHAO Delu¹

(¹ State Key Laboratory of Polymer Physics and Chemistry, Center for Molecular Science, Institute of Chemistry, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

(² Department of Mechanical Engineering, King's College London, University of London, UK)

Abstract The Lagrangian-Eulerian algorithm was used for simulating flow past a confined cylinder with 1:2 diameter/wall ratio. The one-mode Phan-Thien and Tanner (PTT) constitutive model was 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 Baaijens *et al.* for a polyisobutylene/tetradecane (PIB/C14) contraction flow at Deborah number $De = 0.93$. Overall, the simulation has reproduced the experimental results with good accuracy, the agreement between the numerical predictions and the experimental results is fairly well. In addition, the dimensionless drag on the cylinder is reported to be a monotonically decreasing function of the Deborah number, and agrees well with the numerical results of Dou and Phan-Thien.

Key words Lagrangian-Eulerian method, Flow around a confined cylinder