

定常流中聚合物分子的取向

范西俊

(浙江大学化工系)

摘要 本文将求解纳维-司托克斯方程的有限元方法与分子模型(多球刚杆模型)相结合,从而恰当地模拟刚棒状聚合物分子稀溶液的流动。对于几种定常流动问题,求解了流场和多球刚杆模型的最可几取向,并用图显示了这些结果。这些结果说明了这种方法处理的合理性。

关键词 有限元方法,分子模型,分子取向,定常平面流动,轴对称流动

一、引言

如何得到任意流场中有关分子运动的信息例如分子的平均取向和拉伸等,是一个有趣而且有工程应用前景的问题。在简单的均匀流动中,流场是已知的,只要用理论或数值方法求解分子模型位形空间分布函数的扩散方程,然后利用分布函数计算系综平均即可。理论方法在聚物流体分子运动论^[1]中已有详细介绍。人们对数值方法注意较少,因为数值方法得不到本构方程。Stewart 和 Sorrenson^[2]在数值方法方面作了首次尝试。他们于1972年求解了刚性哑铃稀溶液定常剪切流的扩散方程。几乎同时,Warner^[3]求解了定常剪切流和小振幅振荡流中 FENE (有限伸展非线性)哑铃的扩散方程。范西俊^[4,5]改进了 Warner 的方法,计算了定常剪切流中 FENE 哑铃稀溶液的物质函数和分子平均拉伸及加罩 FENE 哑铃浓溶液的物质函数和分子平均拉伸。数值方法还被用来考察位形相关阻力系数对于 FENE 哑铃稀溶液拉伸粘度的影响^[6],以及对虎克哑铃稀溶液流体力学相互作用对物质函数的影响^[7]。近来,Strand, Kim 和 Karriall^[8]将数值方法用于刚杆模型稀溶液的剪切应力增长。多球刚杆和多杆刚杆稀溶液在一般均匀流中的应力张量已用数值方法作了计算^[9,10]。

对于复杂流动,在求解相空间扩散方程之前,必须先确定流场。通常要用一本构方程来描述流体的宏观性质,并将它与守恒方程相结合,才能在一定的初、边值条件下解决流动问题。但按连续介质力学的观点,这样做是“看不见”分子运动的。大部分本构方程不能提供分子运动的信息,即使那些从分子模型导出的本构方程,有关分子运动的信息大部分都在推导中失去。如果已知流场中每一微团中的位形分布函数,这个微团中分子的平均取向和拉伸以及微团的应力张量都可唯一地确定下来。因此一种合理的方法是用一分子模型位形空间分布函数的扩散方程来取代本构方程,然后将它与流场的守恒方程一起求解。最终我们可以得到有关分子运动和宏观流动两者的信息。Bird-Curtiss^[11]提出的多球刚杆模型曾被用来取代本构方程以模拟刚杆状聚合物分子稀溶液的平面定常流

本文于1989年12月17日收到,1990年5月1日收到修改稿。

动^[11]。流动守恒方程在物理空间用边界元方法求解,模型的分布函数的扩散方程在相空间用 Galerkin 方法求解,通过物理空间和相空间的相继迭代得到流动问题的解。当时作者的重点放在流动的模拟上,未计算出流场中分布取向的结果^[12]。本文用有限元方法求解流体力学方程,因为在处理非线性问题时,有限元优于边界元方法,并把这种方法推广到能模拟轴对称流动,并根据位形分布函数确定了流场中分子的取向。

二、多球刚杆模型

现有一些简单的模型,它们的本构方程不能用理论方法得到,但恰恰适合我们的要求。这些模型有:刚性哑铃,多球刚杆、FENE 哑铃和加罩的 FENE 哑铃等。它们可用于模拟刚杆状聚合物分子稀溶液,线性分子的稀溶液,浓溶液和熔体。在这一初探性的研究中,我们仍采用多球刚杆模型,因为它比较完善并且在求解位形空间分布函数扩散方程时的计算工作量比较小。

在非均匀流动中,处于 $\mathbf{x}$ 点的一流体微元的位形空间分布函数 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 关于物理空间的梯度不为零。但与它在位形空间的梯度相比,是可以忽略不计的,因为流场的尺度通常比分子的尺度大得多。因此,在扩散方程中 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 的物理空间导数可以忽略;但它的影响在应力张量表达式中加以考虑。按参考[12]中的假设 1,只有一阶速度梯度包含在 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 的扩散方程之中,此方程可写成:

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} f(\mathbf{u}, \mathbf{x}) - 6De \frac{\partial}{\partial \mathbf{u}} \cdot [\mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \mathbf{u} - \mathbf{K}(\mathbf{x}) : \mathbf{u}\mathbf{u}] f(\mathbf{u}, \mathbf{x}) = 0 \quad (1)$$

为方便起见 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 的归一化常数 J 为:

$$J = \int f(\mathbf{u}, \mathbf{x}) d\mathbf{u} = De^{-1} \quad (2)$$

其中 $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ 为速度梯度张量的转置, De 为 Deborah 数 $U\lambda_N(h, \xi^2)/L$ 。这里 U, L 分别为流场的特征速度和长度, $\lambda_N(h, \xi^2)$ 为参考[11]中在多球刚杆分子模型的扩散方程中出现的时间常数, $\mathbf{u}$ 为沿刚杆的单位向量,模型的结构参数 ξ 等于球半径 d 与相邻球之间的距离 a 之比(见参考[9]的图 1)参数 h 描述流体力学相互作用的强度。

我们通常用 $\boldsymbol{\tau}_p$ 表示聚合物分子对溶液偏应力张量的贡献,它的无量纲形式 $\boldsymbol{\tau}_p^*$ 定义如下:

$$\boldsymbol{\tau}_p = 5(\eta_r - 1)\boldsymbol{\tau}_p^*/2(\tau_r + 3) = n_0 k T De \boldsymbol{\tau}_p^* \quad (3)$$

其中 η_r 为相对粘度,即零剪切率粘度 η_0 与溶剂粘度 η_s 之比; τ_r 为出现在应力张量表达式(见参考[11]的方程(27))中的时间常数 $\lambda_N(2h, -\xi^2)$ 与上述时间常数 $\lambda_N(h, \xi^2)$ 之比, n_0 为分子的数密度, k 为 Boltzman 常数; T 为绝对温度。引入 τ_r 后,我就可把应力张量的两种表达式写为:

$$\text{Kramers 型:} \quad \boldsymbol{\tau}_p^* = 6De + \tau_r \mathbf{K}(\mathbf{x}) : \langle \mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u}\mathbf{u} \rangle + 3\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle - \delta/De \quad (4)$$

$$\text{Giesekus 型:} \quad \boldsymbol{\tau}_p^* = -3De\tau_r \langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle_{(1)} + (1 - \tau_r)(3\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle - \delta/De) \quad (5)$$

其中下标(1)表示反变随动导数; $\langle \dots \rangle$ 表示非归一化的微观量系综平均,例如对张量 $\mathbf{B}$,可写为:

$$\langle \mathbf{B} \rangle = \int \mathbf{B} f(\mathbf{u}, \mathbf{x}, \tau) d\mathbf{u} \quad (6)$$

在定常流动中结构张量 $\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle$ 的反变随动导数为

$$\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle_{(1)} = \mathbf{V} \cdot \nabla \langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle - \mathbf{K}(\mathbf{x}) \cdot \langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle - \langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle \cdot \mathbf{K}(\mathbf{x}) \quad (7)$$

上述两个应力张量的表达式是等价的. 如果用式(4)来计算应力张量, 则分布函数 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 须从包含非线性项 $\mathbf{V} \cdot \nabla f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 的完整扩散方程确定. 应力张量的 Giesekus 表达式在式(7)中 $\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle$ 的物质导数项中考虑了 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 在物理空间的非零梯度.

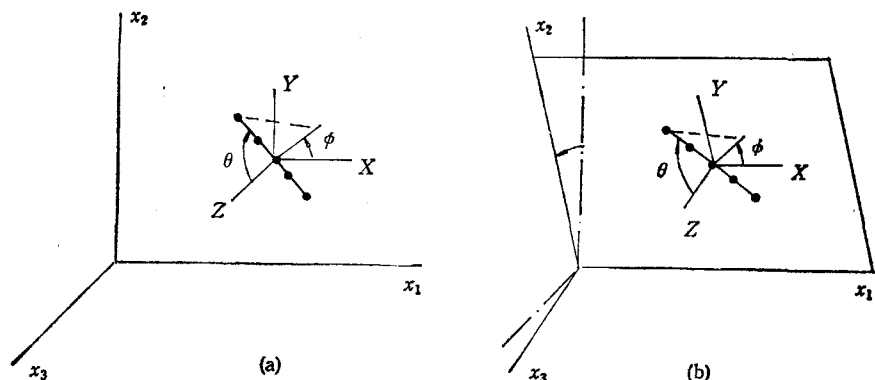


图1 平面和轴对称流动的广义坐标系
(a) 平面流 (b) 轴对称流

在位于 $\mathbf{x}$ 点的流体元的位形空间中取球坐标系为广义坐标系, 它与该位形空间中的笛卡尔坐标的关系以及与平面流动中固定的直角坐标系和轴对称流动的柱坐标系之间的关系表示在图1中. OZ 轴在平面流动中平行于 x_3 坐标线, 而在轴对称流动中指向绕 ox_1 轴的方位角的正方向. 速度梯度 $\mathbf{K}(\mathbf{x})$ 可用 5 个非零分量表示, 对于平面或单轴拉伸流动 $K_1 = \frac{\partial v_1}{\partial x_1}, K_2 = \frac{\partial v_1}{\partial x_2}, K_3 = \frac{\partial v_2}{\partial x_1}, K_4 = \frac{\partial v_3}{\partial x_3}$. 对于轴对称流动 $K_5 = \frac{V_2}{x_2}$ 若用 δ_r, δ_θ 和 δ_z 表示 $\mathbf{x}$ 处位形空间中笛卡尔坐标系的单位向量, 则沿杆的单位向量 $\mathbf{u}$ 可表示为

$$\mathbf{u} = S_n \delta_r + S_\theta \delta_\theta + C_\theta \delta_z \quad (8)$$

此处采用了参考[1]中的符号: $S_n = \sin n\theta, C_n = \cos n\theta, S_m = \sin m\phi, C_m = \cos m\phi$, $n = 1$ 和 $m = 1$ 时下标省略.

Galerkin 方法适宜于求解扩散方程(1), 我们选取球谐函数 $P_n C_m$ 和 $P_n S_m$ 作为测试函数和试验函数空间 $\mathcal{F}$ 的基, 并用微分算子 $\mathcal{L}$ 把方程(1)改写为 $\mathcal{L}(f(\mathbf{u}, \mathbf{x})) = 0$ 这一方程的 Galerkin 强提法为: 求函数 $f^{(N)} \in \mathcal{F}$ 使得

$$\langle \mathcal{L}(f^{(N)}); g \rangle = 0, \quad \forall g \in \mathcal{F} \quad (9)$$

其中 $\langle f; g \rangle = \int f g d\mathbf{u}$. 位形分布函数的第 $2N$ 阶可近似假设为

$$f^{(2N)}(\mathbf{u}, \mathbf{x}) = \sum_{i=0}^1 \sum_{n=0}^N \sum_{m=0}^n A_{nm}^i(\mathbf{x}) \Phi_{2n, 2m}^i \quad (10)$$

而

$$\Phi_{2n, 2m}^0 = P_{2n}^m C_{2m}, \quad \Phi_{2n, 2m}^1 = P_{2n}^m S_{2m}$$

其中 $A_{nm}^i(\mathbf{x})$ 对于给定点 $\mathbf{x}$ 来说为未知系数. 偏应力张量的 5 个分量只与 3 个系数 A_{00}^0 ,

A_{10}^0 和 A_{11}^1 有关且可以方便地计算^[9].

分子的取向分布由函数 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 描述. 即使对于平面流动, 分子也在空间取向, 而不是仅仅在 $x_1 O x_2$ 平面内, 但我们只寻求分子在此平面中的投影的取向. 分子在 $x_1 O x_2$ 平面中投影的最可几取向也许是刚杆状分子运动的有用的统计特征. 我们定义关于 ϕ 的分布函数为

$$\tilde{f}^{(2N)}(\phi, \mathbf{x}) = De \int_0^\pi f(\theta, \phi, \mathbf{x}) S d\theta = \frac{\pi}{2} + De \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^n (B_{nm}^0 \cos 2m\phi + B_{nm}^1 \sin 2m\phi) \quad (11)$$

其中 $B_{nm}^i = 2A_{nm}^i \int_0^\pi P_{2n}^m(t) dt, i = 0, 1$. 在 $x_1 O x_2$ 平面中最可几分布 $\tilde{\phi}$ 是以下方程的根

$$\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^n m (-B_{nm}^0 \sin 2m\phi + B_{nm}^1 \cos 2m\phi) = 0 \quad (12)$$

并满足 $\frac{\partial^2}{\partial \phi^2} f(\tilde{\phi}, \mathbf{x}) < 0$. 在平衡态时 $\tilde{f}(\phi, \mathbf{x}) = \frac{\pi}{2}$, 分子具有各向同性分布.

三、定常流动的模拟

若聚合物溶液的密度为 ρ , 溶剂的粒度为 η_s , 我们可定义当量雷诺数 Re 和佛罗德数如下:

$$Re = \rho UL / \eta_s, \quad Fr = U^2 / gL \quad (13)$$

聚合物溶液通常为不可压缩流体, 在流域 Q 中溶液的宏观质量、动量守恒方程的无量纲形式为

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0; \text{ 在 } Q \text{ 中} \quad (14)$$

$$Re(\alpha - b/Fr) = \nabla \cdot \sigma; \text{ 在 } Q \text{ 中} \quad (15)$$

此文中的物理量不作特别说明的话则均为无量纲, 方程(15)中, b 为体力, a 为惯性力, 总应力张量为

$$\sigma = -p\delta + \dot{\gamma} + \tau_p \quad (16)$$

其中 p 为水静压力, $\dot{\gamma}$ 为应变率张量, 即溶剂对偏应为张量的贡献. τ_p 已在上面方程(3)中规定. 将方程(16)和(14)代入(15), 可得动量守恒方程的另一种形式:

$$Re(\alpha - b/Fr) = -\nabla p + \nabla^2 \mathbf{V} + \nabla \cdot \tau_p, \text{ 在 } Q \text{ 中} \quad (17)$$

流动问题的控制方程归结为方程(14), (17)和(1)以及补充关系式(5). 我们可以分子模型位形空间和流场物理空间之间的迭代过程将(1)和(17)分别求解. 值得指出的是方程(1)和(17)构成一组椭圆型方程, 它比混合型方程更便于数值处理. 当流动问题用粘弹性流体的本构方程来描述时, 控制方程就属于混合型. 因此, 本方法不要求在流域的进口边界规定应力分布. 我们可以计算下游的应力, 不必事先已知上游的应力. 溶液的弹性记忆效应表现在方程(5)中结构张量 $\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle$ 的物质导数中. 为计算这一导数, 必须已知上游的 $\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle$ 值. 这意味着流域的进口边界应置于流变学定常流动区域, 此处结构张量 $\langle \mathbf{u}\mathbf{u} \rangle$ 可用扩散方程唯一地确定, 其物质导数恒为 0.

在编程时, 常常把方程(16)写成

$$\sigma = -p\delta + \varepsilon \dot{\gamma} + \mathbf{R} \quad (18)$$

$$\mathbf{R} = \tau_p + (1 - \varepsilon) \dot{\gamma} \quad (19)$$

其 $\varepsilon(>1)$ 为一适当选取的参数以改善迭代的数值稳定性。这样,基本守恒方程(17)改写为

$$\text{Re}(\mathbf{a} - \mathbf{b}/\text{Fr}) = -\nabla p + \varepsilon \nabla^2 \mathbf{V} + \nabla \cdot \mathbf{R} \text{ 在 } Q \text{ 中} \quad (20)$$

边界条件为

$$\mathbf{V} = \mathbf{V}_i \text{ 在 } \Gamma_1 \text{ 上} \quad (21)$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial \mathbf{n}} = \mathbf{q}_i \text{ 在 } \Gamma_2 \text{ 上} \quad (22)$$

其中 Γ_1 和 Γ_2 为流域 Q 的边界。我们规定 Soblev 空间 $H(Q)$ 和 $H_0(Q)$ 如下:

$$H(Q) = \{V | V, \nabla V \in L^2(Q)\}, H_0(Q) = \{V \in H(Q) | V = 0, \mathbf{x} \in \Gamma_1\}$$

它们的有限维子空间分别记为 $H^h(Q)$ 和 $H_0^h(Q)$ 。我们可按以下方式构造函数子空间

$$\mathcal{H} \subset H^h(Q) \times H^h(Q), \mathcal{H}_0 \in H_0^h(Q) \times H_0^h(Q), \mathcal{P} \in H^h(Q)$$

及 $\mathcal{P}_0 \in H_0^h(Q)$ 。定常流动问题的 Galerkin 弱提法可表达如下: 寻求 $\mathbf{V}_h \in \mathcal{H}$ 它满足本质边界条件(21)以及 $p \in \mathcal{P}$, 使得:

$$\begin{aligned} \text{Re} \langle \mathbf{V}_h \cdot \nabla \mathbf{V}_h; \mathbf{w}_h \rangle + \varepsilon \langle \nabla \mathbf{V}_h^T; \nabla \mathbf{w}_h \rangle + \langle \nabla p_h; \mathbf{w}_h \rangle &= (\text{Fr}/\text{Fr}) \langle \mathbf{b}; \mathbf{w}_h \rangle \\ &- \langle \mathbf{R}; \nabla \mathbf{w}_h \rangle + [\mathbf{q}_i; \mathbf{w}_h]_{\Gamma_2} + [\mathbf{t}_i; \mathbf{w}_h]_{\Gamma_2}, \forall \mathbf{w}_h \in \mathcal{H}. \end{aligned} \quad (23)$$

及:

$$\langle \nabla \cdot \mathbf{V}_h; q_h \rangle = 0; \forall q_h \in \mathcal{P}. \quad (24)$$

其中 $\langle f; g \rangle = \int f g dQ$ 及 $[f; g]_{\Gamma_2} = \int_{\Gamma_2} f g d\Gamma$ 这里 $f g$ 为张量 f 和 g 的标量积。为求解方程(23)和(24),流动区域用四边形的集合代替,记有限元为 Q_e ,

$$Q_h \simeq Q \text{ 且 } Q_h = \bigcup_{e=1}^E Q_e \quad (25)$$

采用等参元时,母元 $\hat{Q} = \{\xi, \eta | -1 \leq \xi \leq 1 \text{ 及 } -1 \leq \eta \leq 1\}$ 取 8 节点的四矩形元,通过 8 个形函数 $\phi_i(\xi, \eta)$ 将其映射到 Q_e , $\phi_i(\xi, \eta)$ 为 ξ 和 η 的不完全二阶多项式。这些形函数为在 $\hat{Q}$ 上 $\mathbf{V}_h$ 和 $\mathbf{w}_h$ 的插值函数,而 p_h 和 q_h 以 ξ 和 η 的双线性多项式为插值函数,即 $\phi_i(\xi, \eta) (i = 1, \dots, 4)$ 。这样得到 $\mathbf{V}_h$ 的总体近似为 $P^2 - C^0$ 型, p_h 为 $P^1 - C^0$ 型,方程(23)和(24)可归结为一组非线性代数方程,其中非线性项 $\langle \mathbf{V}_h \cdot \nabla \mathbf{V}_h; \mathbf{w}_h \rangle$ 和 $\langle \mathbf{R}; \nabla \mathbf{w}_h \rangle$ 在单元分析和装配时间简单迭代方法处理。在编程时,采用波前消去法来分解刚度矩阵。因此,单元分析矩阵装配和消元同时进行,将单元逐个进行处理。在 $\mathbf{R}$ 中 τ_p 之值在 Q_e 的九个高斯点上而不是 8 个节上计算。计算时采用表达式(5)。因此要根据前一次迭代在这些点上求出的速度梯度在相同高斯点的相空间中求解 $f(\mathbf{u}, \mathbf{x})$ 的扩散方程。这些点上的结构张量和它们的梯度也要算出。在一个单元的高斯点上计算方程(5)中的 $\nabla \langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle$ 时,我们宁愿只采用在这些点上的 $\langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle$ 值,因在通过单元的边界时, $\nabla \mathbf{V}$ 也即 $\langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle$ 发生间断。我们无法知道邻近单元中的 $\langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle$ 对此单元中的 $\langle \mathbf{u} \mathbf{u} \rangle$ 的影响。我们只能设想,这种影响是通过这个单元节点上的速度来传递的,而节点速度值在有限元近似中是能很好确定的量。我们就张量 $\mathbf{B}$ 来说明。一个单元的九个高斯点 $\mathbf{x}_i$ 上的 $\mathbf{B}(\mathbf{x}_i)$ 的梯度值可用

该单元 8 个节点 $\mathbf{x}_i$ 上张量值 $\mathbf{B}(\mathbf{x}_i)$ 计算:

$$\nabla \mathbf{B}(\mathbf{x}_i) = \sum_{l=1}^8 \nabla \phi_l(\mathbf{x}_i) \mathbf{B}(\mathbf{x}_l), \quad l = 1, \dots, 9 \quad (26)$$

因为节点值 $\mathbf{B}(\mathbf{x}_i)$ 用九个插值函数 $\phi'_m(\mathbf{x}_i)$ 从高斯点 $\mathbf{x}'_m$ 上的已知值 $\mathbf{B}(\mathbf{x}'_m)$ 计算, 高斯点 $\mathbf{x}'_i$ 上的梯度值则为:

$$\nabla \mathbf{B}(\mathbf{x}_i) = \sum_{m=1}^9 \sum_{l=1}^8 \nabla \phi_l(\mathbf{x}_i) \phi'_m(\mathbf{x}_i) \mathbf{B}(\mathbf{x}'_m), \quad l = 1, \dots, 9 \quad (27)$$

四、算例和讨论

上述数值方法已用于若干定常流动, 如: Poiseuille 管流, 越过横缝的平面流动以及轴对称收敛流动等计算。算例中不计体力 $\mathbf{b}$ (方程(17)), 在迭代过程中可以同时得到关于流场和分子运动的信息。计算结果表明了方法处理上的合理性。

分子的运动用多球杆的取向来表征。首先计算了圆管中的 Poiseuille 流以考察 De 和速度梯度对于分子取向的影响。在进、出口流动边界规定最大值为 2.0 的抛物线速度分布, 在壁面给定无滑移条件, 在轴线处给出径向速度分量为零等本质边界条件。自然边界条件为垂直于轴线的速度梯度分量为零和轴上应力的聚合物贡献部分为零。计算中发现, 充分发展的多球杆分子稀溶液的充分发展速度剖面与抛物线分布十分接近, 通常可用抛物线分布作为近似边界条件。如果要求更精确地计算, 则可取根据近似边界条件算得的管中间截面上的速度剖面作边界条件。Poiseuille 流中在圆管子午面上多球杆的最可几取向分布表示在图 2 中。图上同时表明了几个典型的 De 数。在管轴处, 速度梯度为零, 分子的取向分布各向同性, 最可几取向分布无法确定。如果 De 保持不变, 在 Poiseuille 流中雷诺数 Re 对取向分布无影响。然而在某种流体的实际流动系统中, De 并不是与 Re 无关, Re 的变化会相应地改变 De , 再改变分子的取向分布。值得指出, 按壁面剪切率计算的韦森伯数大于 $4.0 \times De$, 因为用抛物线剖面的壁面速度梯度计算的话, 韦森伯数刚好为 4 倍的 De 。

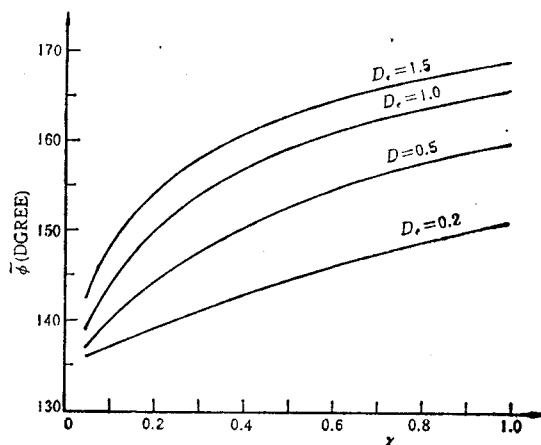


图 2 Poiseuille 流中管子午面上, 多球杆模型的最可几取向分布
(其它参数为 $Re = 0$, $Fr = 1$, $\eta_r = 1.5$)

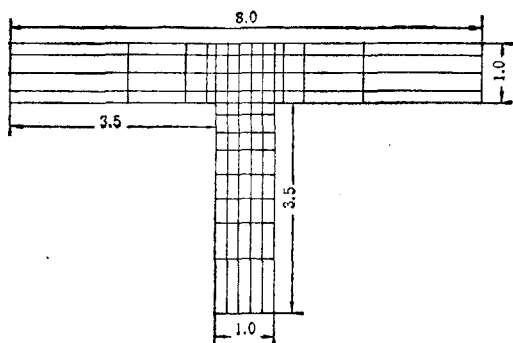


图3 越过横缝流动的计算网格

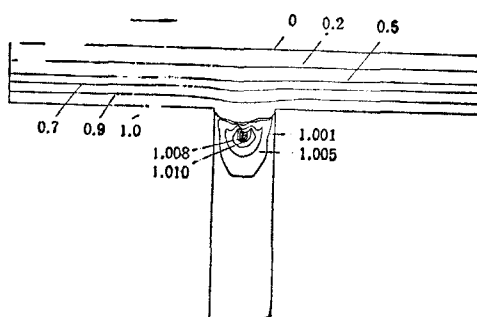


图4 越过横缝流动的流型

 $Re = 0, De = 0.5, \nu_r = 1, \eta_r = 1.5$
图5 在越过横缝流动中多球杆的最可几取向分布 $Re = 0, De = 0.2, \nu_r = 1, \eta_r = 1.5$

越过一横缝的平面流动的计算网格表示在图3中。虽然网格有92个单元和327个节点、但仍不够精细到足以精确地预测小尺度的涡流,这种涡流与局部格子尺度相当或更小。这可以在图4中扭曲的小涡流型中看出。但是由于计算机的限制,我们未追求更精细网格的计算结果。 $Re = 0, De = 0.2$ 和 0.5 时的流型已绘制,后者表示在图4中,涡

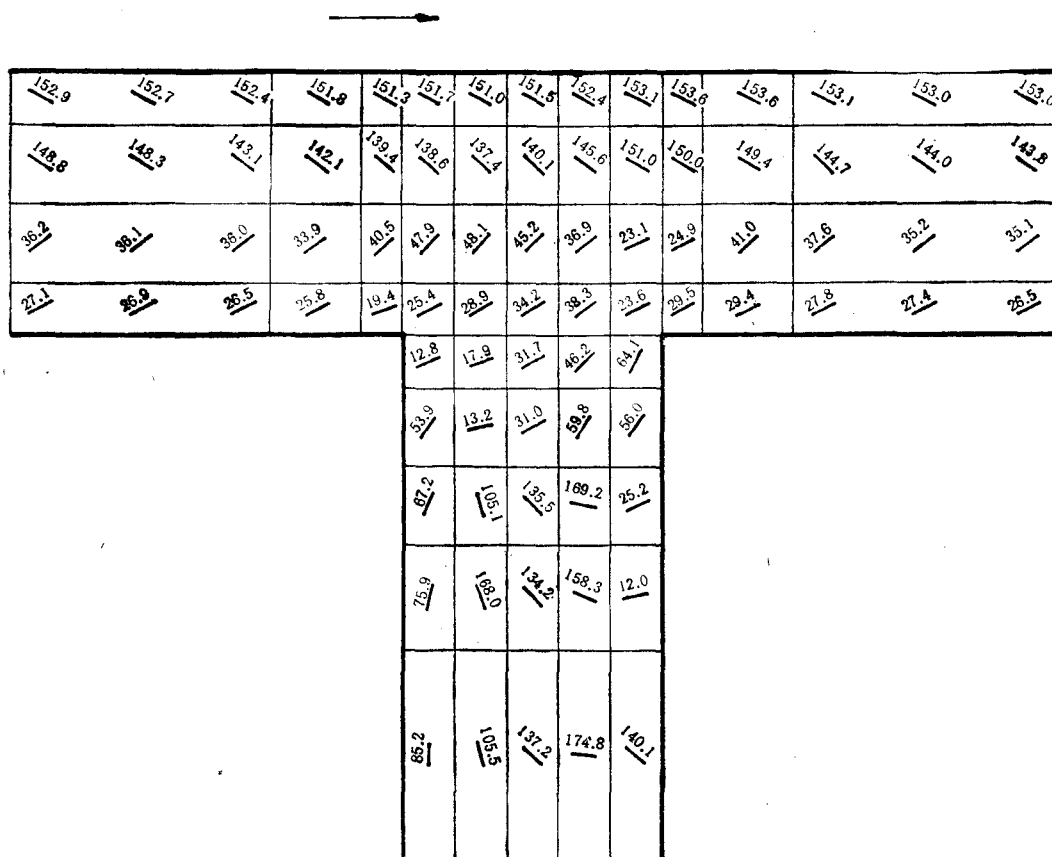


图6 在越过横缝流动中多球杆的最可几取向分布, $Re = 20$, $De = 0.2$, $t_r = 1$, $\eta_r = 1.5$

流明显可见。涡流的中心略向上游偏离缝的中心线, 这可归因于溶液的粘弹性效应。 $Re = 20$, $De = 0.2$ 和 0.45 的流型无明显的区别, 这意味着, 雷诺数对涡流流型的影响比 Deborah 数强得多。当 $Re > 0$ 时, 涡被通过缝上端的流体的惯性力所变形, 惯性力随 Re 增加而增加, 最后支配该区域的流动。多球杆的最可几取向在每个单元的九个高斯点上计算, 在 $Re = 0$, $De = 0.2$, 0.5 和 $Re = 20$, $De = 0.2$, 0.45 时, 流域的最令人感兴趣部分的结果已画出, 其中一些表示在图 5 和图 6 中。由这些图也许可得出一个相反的结论: 雷诺数对分子取向的影响要比 Deborah 数小。对于给定的 De , 雷诺数只能通过速度梯度的变化来影响分子取向; 取向的改变只能在速度梯度对雷诺数变化敏感的流域部分观察到, 例如在应力奇点和缝的进口处附近。而 Deborah 数影响流域中每一处的分子取向。注意这一情形中韦森伯数约为 $6.0 \times De$ 。

通过 $4/1$ 收缩管的流动的计算网格表示在图 7 中共有 118 个单元 411 个节点。极大值为 0.125 的抛物型速度剖面作为进口流动边界上的速度分布, 而出口流动边界的速度分布由相应圆管的 Poiseuille 流计算得到, 其余的边界条件与上述 Poiseuille 流动问题相同。 $De = 0.2$, 0.4 和 0.6 的流型已画出, 其中之一表示在图 8 中。由此可见随着 De 的增加涡流区向收缩口处延伸, 第二个小涡也随之生长。波动状的流线可解释为局部网

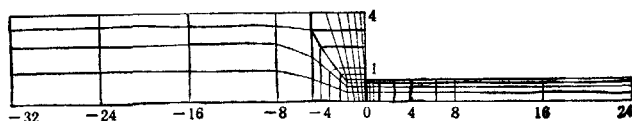
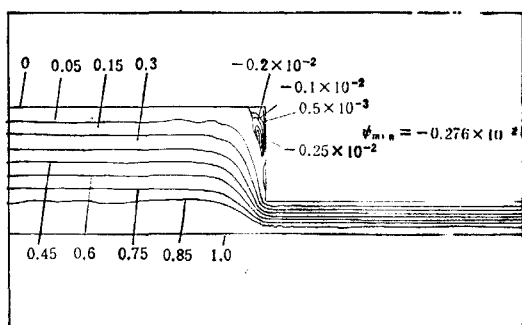
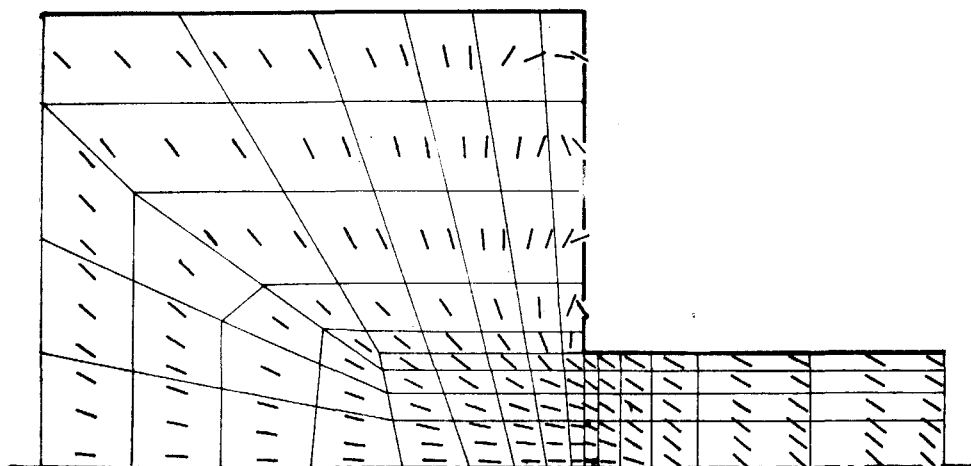


图 7 收缩管流动的计算网格

图 8 通过收缩管流动的流型 $Re = 0$, $De = 0.6$, $t_r = 1$, $\eta_r = 1.3$ 图 9 4/1 收缩管流中分子的最可几取向, $Re = 0$, $De = 0.2$, $t_r = 1$, $\eta_r = 1.3$

格过于粗糙,不足以得到准确形状的流线。在画图软件中采用的样条拟合方法也会放大由于流函数计算误差引起的波动形状。收缩流中多球杆的最可几分布表示在图 9 和图 10 中。图中同时画出了部分计算网格。分子的取向对于拉伸流动十分敏感,即使在远离收缩口处的区域,分子已被近轴线处的收敛流动高度取向。在进入收缩口处,由于管壁的影响,分子迅速调整自己的取向,最后转化为 Poiseuille 流中的取向。当 $De = 0.6$ 时,在接近收缩口处,分子有反常取向表现(见图 10)这一现象需进一步考察和说明。这里韦森伯数也约为 $4.0 \times De$ 。

这一方法未解决数值发散问题,当 De 和 η_r 增加时,数值收敛性变差。设在每一次迭代中要求解的代数方程可表示为:

$$\{A\}[x] = [b]$$

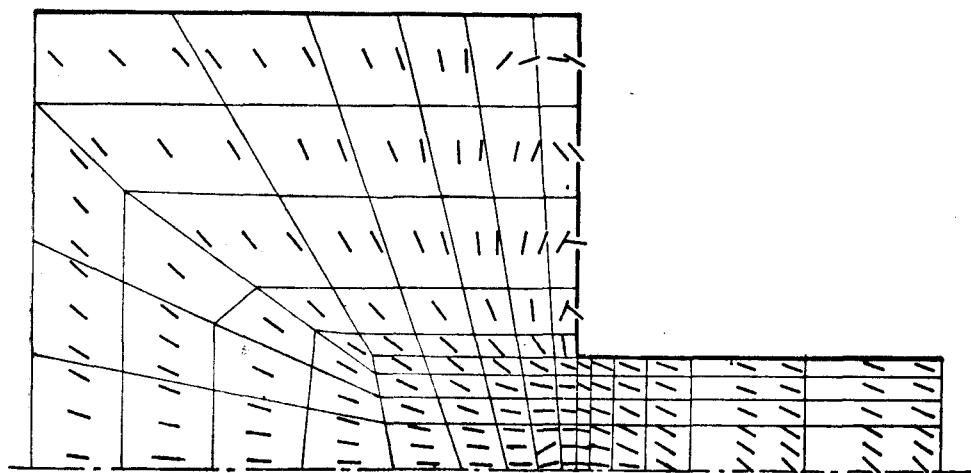


图10 4/1收缩管流中分子的最可几取向 $Re = 0$, $De = 0.6$, $\epsilon_r = 1$, $\eta_r = 1.3$

[x] 误差的模与 $\{A\}$ 的条件数和 [b] 误差的模有关。应力奇点的影响, 确定速度梯度和物质导数时的数值误差, 求解分子模型时的误差最后增加了 [b] 误差的模, 而且它随 De 和 η_r 的增加而增加。因此在 $\{A\}$ 条件数和 De , η_r 大到一定程度时难以得到收敛解。如何改善此方法的数值收敛性是值得进一步探讨的课题。

参 考 文 献

- [1] Bird R. B., Curtiss C. F., Armstrong R. C., Hassager O., Dynamics of Polymeric Liquids, Vol. 2, Kinetic Theory, Wiley, New York (1987).
- [2] Steward W. E., Sorensen J. P., Trans. Soc. Rheol., 16(1972), 11—13.
- [3] Warner H. R. Jr., Ind. Eng. Chem. Fundamentals, 11(1972), 379—387.
- [4] Fan X. J., J. Non-Newtonian Fluid Mech., 17(1985), 125—144.
- [5] Fan XJ, J. Non-Newtonian Fluid Mech., 17(1985), 251—265.
- [6] Fan XJ, Bird R. B., Renardy M., J. Non-Newtonian Fluid Mech., 18(1985), 255—277.
- [7] Fan XJ, J. Chem. Phys., 85(1986), 6237—6238.
- [8] Strand S. R., Kim S., Karriall S. J., J. Non-Newtonian Fluid Mech., 14(1987), 311—329.
- [9] Fan XJ, Acta Mechanica Sinica, 1(1989), 49—59.
- [10] Xu ZF, Dissertation, M. S. Zhejiang University, (1989).
- [11] Bird R. B., Curtiss C. F., J. Non-Newtonian Fluid Mech., 14(1984), 85—101.
- [12] Fan XJ, Acta Mechanica Sinica, 4(1989), 216—226.

MOLECULAR ORIENTATION IN STEADY FLOW FIELDS

Fan Xijun

(Department of Chemical Engineering, Zhejiang University)

Abstract The finite element method to solve the Navier-Stokes equation is generalized to combine with a molecular model, the multibead rod, so that the flow problems of rigid rodlike suspensions can be simulated properly. The solutions of flow fields and the most probable orientations of multibead rods have been obtained for several steady flow problems and both shown in figures of this paper. The interesting results prove the treatment of this method reasonable.

Key words finite element method, molecular model, molecular orientation, steady planar flow, axisymmetric flow