

刚杆状聚合物和混合层中拟序结构的相互影响¹⁾

余钊圣

(浙江大学力学系, 流体传动及控制国家重点实验室, 杭州 310027)

林建忠

(杭州应用工程技术学院, 浙江大学力学系, 杭州 310027)

摘要 用谱方法 (即 Galerkin 方法) 求解多球刚杆模型位型空间分布函数的扩散方程, 用拟谱方法求解物理空间的 N-S 方程, 同时得到了加入刚杆状聚合物分子的二维混合层中拟序结构的演变过程和聚合物分子的最可几取向. 计算结果较为合理地描述了聚合物分子和拟序结构的相互影响.

关键词 多球刚杆分子模型, 混合层, 拟序结构, 谱方法

引 言

添加聚合物是控制流场拟序结构的手段之一. 自 70 年代以来, 人们对混合层中的拟序结构进行了深入和广泛的研究^[1], 而对于加入聚合物而产生了粘弹性的混合层流场, 国内外开展的研究工作还不多, 最新的进展是 Azaiez 等^[2]用 Oldroyd-B 和 FENE-P 两种流变模型求解了流场. 由于他们直接采用本构方程进行求解, 因而不能给出任何有关分子运动的微观信息. 按分子模型理论^[3], 如果已知流场中每一微团中的位型分布函数, 则这个微团的应力张量可唯一地确定下来. 因此一种合理的方法是用一分子模型位型空间分布函数的扩散方程来取代本构方程, 然后与动量方程联合求解, 可得到有关分子运动和宏观运动两者的信息. 多球刚杆模型是描述刚杆状聚合物分子如聚丙烯、螺旋形蛋白质等的经典模型, 这种模型强调分子的取向分布而忽略分子的拉伸和弯曲运动, 文献 [4, 5] 曾用这种模型取代本构方程模拟了平面定常流动, 获得较为满意的结果. 本文第一次将这种分子模型应用到演化型流场, 计算结果合理地揭示了刚杆状聚合物分子与混合层大涡拟序结构之间的相互影响.

1 多球刚杆模型和数值方法

多球刚杆模型完整的描述可参见文献 [3], 其无量纲取向分布函数 f 的扩散方程和应力张量 τ_p 的表达式为

$$\frac{\partial f(u, x, t)}{\partial t} = \frac{1}{6De} \left\{ \frac{\partial}{\partial u} \cdot \frac{\partial}{\partial u} f(u, x, t) - \frac{\partial}{\partial u} \cdot [K(x, t) \cdot u - K(x, t) : uuu] f(u, x, t) \right\} \quad (1)$$

1997-06-17 收到第一稿, 1998-04-24 收到修改稿.

¹⁾ 国家自然科学基金资助项目 (19572058).

$$\tau_p = -3t_r \langle uu \rangle_{(1)} + \frac{1}{De} [1 - t_r] (3 \langle uu \rangle - \delta) \quad (2)$$

上式中, K 为速度梯度张量的转置, u 为沿刚杆的单位向量, t_r 为该模型中两个时间常数之比, De 为 Deborah 数, δ 为单位张量, 式 (2) 中下标 (1) 表示随动导数, $\langle \cdots \rangle$ 表示微观量的系综平均.

物理空间采用的无量纲控制方程为

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + \nabla \left(p + \frac{|\mathbf{V}|^2}{2} \right) = \mathbf{V} \times \boldsymbol{\omega} + \frac{\nabla^2 \mathbf{V}}{Re} + \frac{5(\eta_r - 1)}{2(t_r + 3)Re} \nabla \cdot \boldsymbol{\tau}_p \quad (4)$$

式中 η_r 表示相对粘度, Re 是基于溶剂粘度的雷诺数.

用谱方法求方程 (1), 求解过程参见文献 [4], 不同之处在于现在推广到了非定常情况, 故采用隐式的 Crank-Nicolson 格式来推进方程. 用文献 [6] 曾采用过的拟谱方法求解方程 (3) 和 (4). 初始速度场由双曲正切型分布的基本流叠加扰动所组成, 见文献 [6].

2 结果分析和讨论

图 1 和图 2 显示了混合层卷起和配对时的等涡线图和部分配置点上分子的最可几取向.

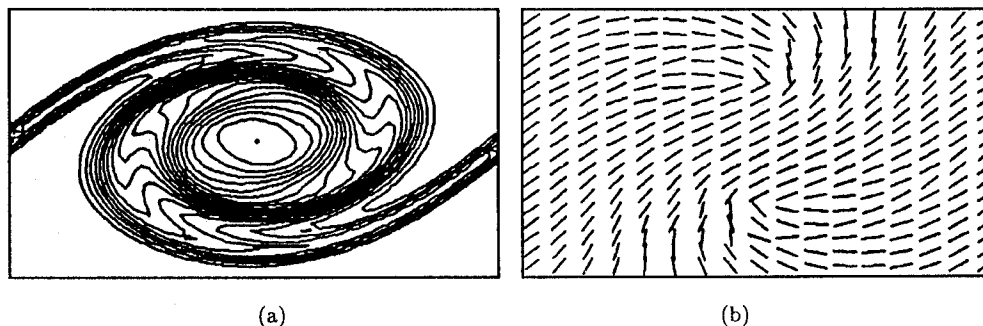


图 1 (a) 卷起过程的等涡线和 (b) 分子最可几取向 ($Re = 400$, $De = 1.0$, $\eta_r = 1.5$, $t = 40$)
Fig.1 (a) Vorticity contours and (b) the most probable orientations of polymer molecules

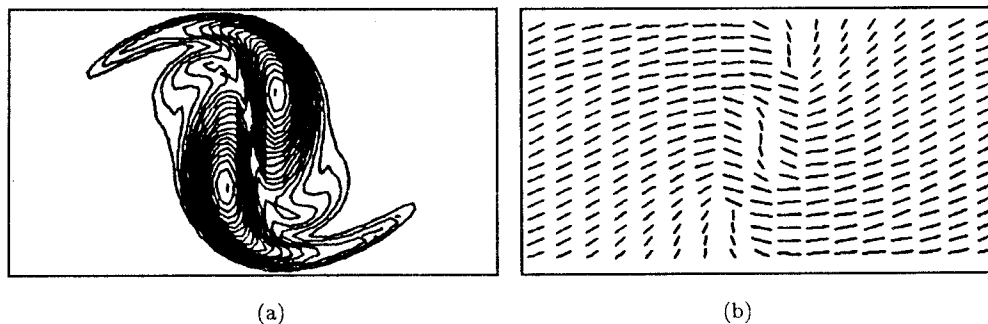


图 2 (a) 配对过程的等涡线和 (b) 聚合物分子最可几取向 ($Re = 400$, $De = 1.0$, $\eta_r = 1.5$, $t = 70$)
Fig.2 (a) Vorticity contours and (b) the most probable orientations of polymer molecules

由于拟序结构的存在, 分子的最可几取向也很有规律, 基本趋向于大涡的诱导方向, 在辫子涡里, 可以看出分子的最可几取向角度略大于相邻的分子. 图 1 表明了拉伸率对分子取向的影响很大. 在剪切率较大的混合层中心区, 分子的最可几取向差别不大, 不过卷起的大涡对涡辫区有着较强的拉伸作用, 以致这些区域分子的倾斜角度要大于涡核区的. 而在剪切率很小的外区, 分子的取向对拉伸极为敏感, 横向的拉伸几乎使取向为 90° , 而流向的拉伸几乎使其为 0° .

计算结果表明: 在二维混合层中, 无论牛顿流体还是粘弹性流体, 较弱的粘性扩散 (可近似用流场最大涡量绝对值来度量) 总是对应于基波和次谐波较强的发展, 较强的大涡卷起, 准定常后基波较高的振荡频率, 在涡配对合并过程中两涡较快地旋转运动, 较长的大涡合并过程, 以及由于涡量扩散慢自然导致的较长的大涡生存期. 如图 3 就反应了最大涡量值 (绝对值) $|\omega|_{\max}$ 和基波能量 E_1 随时间发展——对应的关系. 上面提到的这些现象正是反应大涡拟序结构运动最主要的特征, 因此只需方便地分析聚合物对粘性扩散和基波 (或次谐波) 发展的影响就可知其

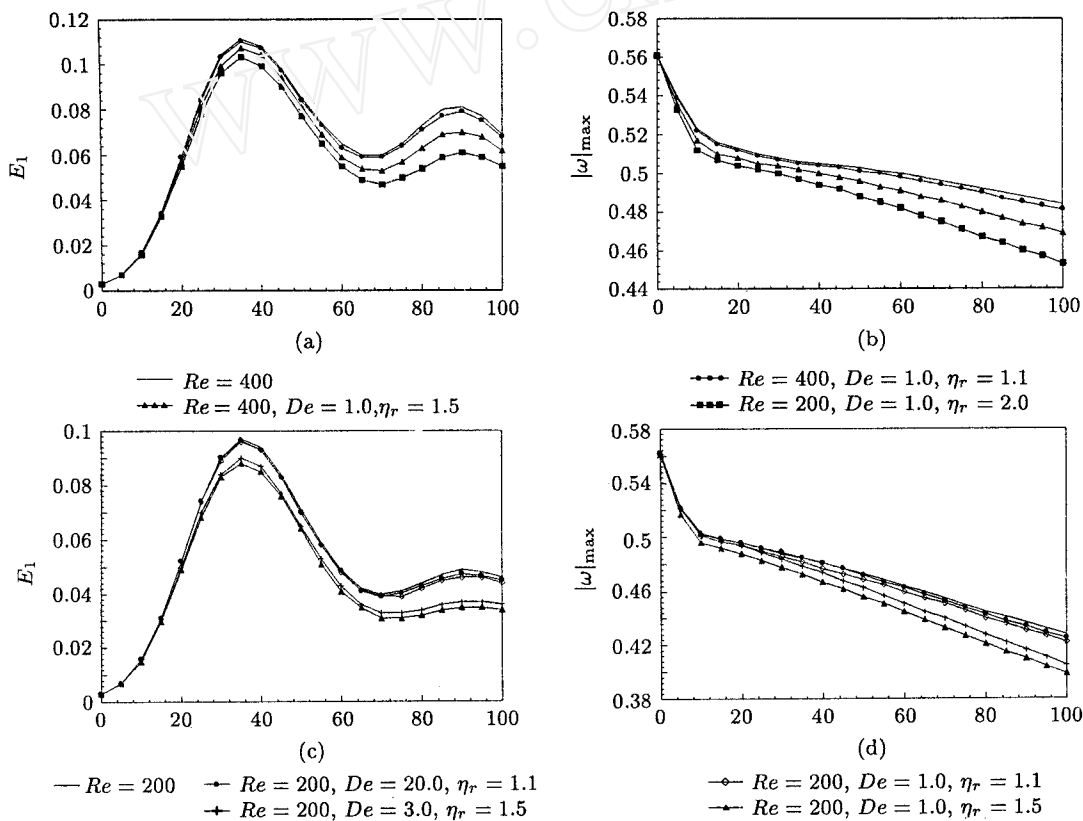


图 3 Re , De 和 η_r 数对 (a), (c) 基波能量和 (b), (d) 最大涡量值 (绝对值) 随时间变化的影响

Fig.3 Effects of Re , De and η_r on time-developments of E_1 and $|\omega|_{\max}$

对拟序结构形成和演变的影响. 图 3(b)~(d) 中, 初期曲线较陡的部分代表涡量分布较集中的初始扰动波的涡量扩散, $|\omega|_{\max}$ 快速下降直到基本流的最大涡量值 (0.5) 附近; 之后由于大涡涡核开始形成, 粘性扩散大为变慢, 由图可知粘弹性流体的涡量扩散也近似是线性的. 图 3(a), 图 3(b) 表明相对粘度越大, 涡量扩散就越快, 这个结论是很自然的. 值得注意的是: 在小和中等 De 数 (如 20) 下, 聚合物作为外加项, 总是不同程度地加强了流场的涡量扩散, 削弱了基波能量

的发展. 在大聚合物粘度情况下, 这一点很明显, 在其小到为溶剂粘度的十分之一时 ($\eta_r = 1.1$), 从图 3 中还是可以看出来一点, 但差异已经很小. 图 3(c), 图 3(d) 表明当溶液粘度相同时, De 数大的, 对应的都要大一些, 这说明了聚合物的弹性在一定程度上有抑制涡量扩散的作用.

另外, 图 3 还揭示: 如果以总的溶液粘度来定义雷诺数, 则可以得出不同的结论: 在相同雷诺数下, 粘弹性流体的涡量扩散慢, 基波发展强 (如比较 $Re = 400$, $\eta_r = 2.0$ 和 $Re = 200$ 两种情况). 这就与 Azaiez 和 Homsy^[2] 在基于弹簧哑铃模型的计算得出的结论相一致.

3 结 论

混合层流场中添加刚杆状聚合物后, 在中小 De 数下, 聚合物作为外加项考虑, 总是不同程度地加强了流场的涡量扩散, 削弱了基波和次谐波能量的发展, 从而减弱了大涡卷起程度, 减小了涡配对合并过程中两涡旋转速度, 缩短了涡量合并过程以及大涡的生存期, 因此可以说聚合物对混合层中拟序结构的形成和发展起抑制作用. 不过发现聚合物引起的弹性却较轻微地起着相反的作用. 这两种影响都会随着聚合物粘度的增加而更加明显.

溶剂的粘度相对于聚合物粘度来说, 其涡量扩散作用要显著得多. 因此如果以总的溶液粘度来定义雷诺数, 则关于聚合物对流场影响的结论刚好与上面相反. 这就与 Azaiez 和 Homsy^[2] 基于弹簧哑铃模型计算结果得出的结论相符, 说明刚杆状聚合物和易拉伸的聚合物对混合层流场起的作用是相似的.

大涡引起的拉伸作用对刚杆状聚合物分子的取向影响很大, 尤其在混合层外区.

参 考 文 献

- 1 Rogers MM, Moser RD. The three-dimensional evolution of a plane mixing layer: the Kelvin-Helmholtz rollup. *J Fluid Mech*, 1992, 243: 183~226
- 2 Azaiez J, Homsy GM. Numerical simulation of non-Newtonian free shear flows at high Reynolds numbers. *J Non-Newtonian Fluid Mech*, 1994, 52: 333~374
- 3 Bird RB, Hassager O, Armstrong RC, Curtiss CF. Dynamics of Polymeric Liquids. Vol.2, Kinetic Theory. New York: Wiley Press, 1987
- 4 Fan Xijun. Molecular model and flow calculation: 1. the numerical solutions to multibead-rod models in homogeneous flows. *Acta Mechanica Sinica*, 1989, 5(1): 49~59
- 5 范西俊. 定常流中聚合物分子的取向. 力学学报, 1991, 23(4): 400~410 (Fan Xijun. Orientation of the polymer molecules in steady flows. *Acta Mechanica Sinica*, 1991, 23(4): 400~410 (in Chinese))
- 6 余剑圣, 林建忠. 粘弹性二阶流体混合层流场拟序结构的数值研究. 见: 梁在潮主编, 第五届全国湍流与流动稳定性学术会议论文集, 第二届全国工程湍流及流动模拟学术会议论文集. 武汉: 水利水电大学出版社, 1997, 211~217 (Yu Zhaosheng, Lin Jianzhong. Numerical research on the coherent structure in the viscoelastic second-order mixing layers. In: Liang Zaichao ed. No.5 Meeting on Turbulence and Flow Instability. Wuhan: 1997. 211~217 (in Chinese))

INTERACTIONS OF THE RIGID-RODLIKE POLYMER AND THE COHERENT STRUCTURES IN A MIXING LAYER¹⁾

Yu Zhaosheng

(Zhejiang University, Hangzhou 310027, China)

Lin Jianzhong

(Zhejiang University, Hangzhou Institute of Applied Engineering, Hangzhou 310027, China)

Abstract The spectral method, ie. Galerkin method and the pseudo-spectral method were used to solve the diffusion equation of the distribution function in configurational space for a multibead-rod model and N-S equation respectively. The properties of the coherent structure in a plane mixing layer with rigid-rodlike polymer additives and the most probable orientations of the multibead rods were obtained simultaneously. The results indicate that adding polymer to the Newtonian fluid will make flows have stronger vorticity diffusion, accompanied with weaker fundamental and subharmonic perturbations, less intense vortex roll-up of mixing layer, lower oscillation frequency of fundamental energy, slower rotational motion of neighboring vortices and shorter life times of eddies. As a whole, polymer additives inhibit the formation and development of the coherent structures. However, if Re is based on total viscosity, the conclusion about effect of the viscoelasticity is reverse and thereby is in agreement with that of Azaiez and Homsy^[2] from the spring-bead model. It is also found that the maximum absolute value of vorticity grows with the increase of De when other parameters keep unchanged, indicating that the elasticity of polymer plays opposite roles to the viscosity on the flows. The stretching of large eddies has a great effect on the behavior of rod-like molecules since the most probable orientations of rods seems to coincide with the local fluid stretching directions, especially in outer region of the mixing layer.

Key words multibead-rod molecular model, mixing layer, coherent structure, spectral method

Received 17 June 1997, revised 24 April 1998.

¹⁾ The project supported by the National Natural Science Foundation of China (19572058).