

研究论文

# 聚物流动的多尺度模拟

张小华, 欧阳洁, 孔 倩

(西北工业大学应用数学系, 陕西 西安 710072)

**摘要:** 基于聚合物分子运动论, 提出了一种新的计算聚物流体的多尺度方法。该方法在宏观尺度上应用无网格方法求解速度场, 在微观尺度上应用随机模拟技术计算聚合物对应力的贡献, 从而避免需要本构方程来封闭连续性方程和动量守恒方程。对 Hooke 哑铃模型、FENE 哑铃模型、FENE-P 哑铃模型, 模拟了突然起动平面 Couette 流动; 对 Hooke 哑铃模型, 模拟了方腔驱动流动。从而验证了该方法的有效性和计算结果的可靠性。

**关键词:** 无网格方法; Brown 动力学模拟; 多尺度方法; 聚物流体

中图分类号: O 373

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2007) 08-1897-08

## Micro-macro simulation of polymeric fluid flow

ZHANG Xiaohua, OUYANG Jie, KONG Qian

(Department of Applied Mathematics, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, Shaanxi, China)

**Abstract:** Based on simulation of molecular models of polymeric fluids, a new micro-macro method for numerical calculation of viscoelastic flow is presented in this paper. This method coupled the mass and momentum conservation equations at the macroscopic level, with a stochastic differential equation which models the evolution of the polymer configurations at the microscopic level. Accordingly, the velocity field was determined by solving the conservation equation with a meshless method, and the stress was computed from the molecular configuration rather than from closed-form constitutive equations. Thus this method bypassed the need for a rheological constitutive equation to describe the polymeric fluid. In order to validate this method and to demonstrate its robustness, the start-up planar Couette flow was studied for Hookean, FENE and FENE-P dumbbell models and the lid-driven cavity flow was studied for Hookean dumbbell models.

**Key words:** meshless method; Brownian dynamics simulation; multiscale method; polymeric flow

### 引 言

随着聚合物成型研究的深入和高分子科学与工程的发展, 聚物流体的理论和数值研究变得越来越重要。目前数值模拟聚物流体主要是在连续介质力学理论的框架下, 通过推导微分型或积分型的

近似本构方程来描述应力和速度场之间的关系, 然后结合流动控制方程应用宏观数值方法进行求解。然而在一般情况下, 近似封闭本构方程是非常困难的, 且即使得到的本构方程也不能完全真实地反映流动情况<sup>[1]</sup>。最近 Laso 和 Öttinger<sup>[2-3]</sup>提出了一种新的数值方法用来求解黏弹性流动问题, 即

2006-09-15 收到初稿, 2007-03-03 收到修改稿。

联系人: 欧阳洁。第一作者: 张小华 (1980—), 男, 博士研究生。

基金项目: 国家自然科学基金重大项目 (10590353); 陕西省自然科学基金项目 (2005A16)。

Received date: 2006-09-15.

Corresponding author: Prof. OUYANG Jie. E-mail: jieouyang@nwpu.edu.cn

Foundation item: supported by the National Natural Science Foundation of China (10590353) and the Natural Science Foundation of Shaanxi Province (2005A16).

CONNFESSIT (calculation of non-Newtonian flow; finite elements and stochastic simulation technique), 该方法的基本思想是在宏观尺度上采用有限元方法计算速度场, 而在微观尺度利用随机模拟方法计算大量聚合物分子的构形, 然后计算其系综平均, 得到聚合物分子对应力的贡献, 从而避开了需要封闭的本构方程。Laso 和 Öttinger<sup>[2]</sup> 应用该方法数值模拟了一维突然起动的平面 Couette 流。随后 Feigl 等<sup>[4]</sup> 将该方法推广到二维问题, 采用 Hooke 哑铃, 求解了稳态的 4 : 1 轴对称收缩流。Hu 等<sup>[5]</sup> 采用 FENE 哑铃模型, 模拟了瞬态的 4 : 1 平面收缩流。由于 CONNFESSIT 方法在微观尺度需要计算大量聚合物分子的构形, 因而计算费用和统计误差比较大, 所以 Bonvin 等<sup>[6]</sup> 讨论了 CONNFESSIT 方法的方差缩减技术。方建农等<sup>[7-8]</sup> 对该方法进行了改进, 并做了一些尝试性工作, 如采用 Hooke 哑铃模型, 应用流线有限元耦合 Brown 动力学模拟了平行平板间的圆柱绕流等。Li 等<sup>[9-10]</sup> 研究了该方法的收敛性和在小 Deborah 数情况下的应用等。但由于该方法在宏观尺度上采用基于网格的有限元方法求解, 在某些问题的求解过程中会遇到一些困难, 如自由表面流、注塑成型过程中聚合物熔体界面追踪等问题。近年来发展的无网格方法<sup>[11-16]</sup> 具有有限元等方法无法比拟的优势, 如不需要网格生成, 容易求解大变形、追踪界面等问题。因此基于 CONNFESSIT 方法的基本思想, 本文提出了一种新的多尺度方法 CVFMFSS (calculation of viscoelastic flow; mesh free and stochastic simulation method), 即无网格方法与随机模拟技术相耦合来求解聚合物流动问题。

### 1 控制方程

对于不可压缩等温流 (忽略体力), 连续性方程和动量守恒方程分别为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \tag{1}$$

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot \mathbf{T} \tag{2}$$

其中,  $\mathbf{u}$ 、 $P$ 、 $\mathbf{T}$  分别表示速度、压力和偏应力张量。偏应力张量可分解为 Newtonian 溶剂贡献和聚合物贡献, 即

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}^s + \mathbf{T}^p \tag{3}$$

其中,  $\mathbf{T}^s = \eta_s (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)$ ,  $\eta_s$  为溶剂黏度;

$\mathbf{T}^p$  为聚合物应力张量。于是式 (2) 可改写为

$$\rho \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial t} + \rho \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{u} = -\nabla P + \nabla \cdot (\eta_s (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T)) + \nabla \cdot \mathbf{T}^p \tag{4}$$

由于聚合物应力张量未知, 所以式 (1) 和式 (4) 并不是封闭的。在传统的宏观数值方法中, 通常从连续介质理论或分子运动论对  $\mathbf{T}^p$  进行近似, 从而使式 (1) 和式 (4) 封闭。本文中  $\mathbf{T}^p$  将通过聚合物分子模型计算得到, 且不需要对其进行任何近似。

### 2 哑铃分子模型及随机模拟

模拟聚合物流体的一个主要目的是计算未知的聚合物应力。在本文中, 考虑简单的珠簧哑铃模型<sup>[3,17]</sup>, 该模型由两个质量为  $m$  的刚性小珠和一根无质量的弹簧组成 (如图 1), 珠在溶剂中运动时受到阻力作用, 其阻力系数为  $\zeta$ 。构形向量  $\mathbf{Q}$  表示两珠之间的瞬时距离和在空间中的角取向。在聚合物稀溶液中, 各个哑铃之间没有相互作用, 因而单个哑铃分子的运动可由如下的随机微分方程来描述<sup>[2-6]</sup>

$$d\mathbf{Q}(t) = \left[ \boldsymbol{\kappa}(t) \cdot \mathbf{Q}(t) - \frac{2}{\zeta} \mathbf{F}(\mathbf{Q}) \right] dt + \sqrt{\frac{4kT}{\zeta}} d\mathbf{W}(t) \tag{5}$$

其中,  $\boldsymbol{\kappa} = (\nabla \mathbf{u})^T$  为速度梯度的转置;  $k$  为 Boltzmann 常数;  $T$  为绝对温度;  $d\mathbf{W}(t) = \sqrt{dt} \mathbf{W}(t)$  是随机项, 常称为 Wiener's 过程, 其一阶矩为  $\langle \mathbf{W}_i(t) \rangle = 0$ , 二阶矩为  $\langle \mathbf{W}_i(t) \mathbf{W}_j(t') \rangle = \delta_{ij} \min(t, t')$ ,  $\langle \rangle$  表示系综平均。在式 (5) 右端有 3 项, 其中第一项表示流体动力学力; 流体流动过程中可旋转和拉伸哑铃, 从而改变哑铃构形向量; 第二项表示弹力; 第三项是 Brown 运动力。

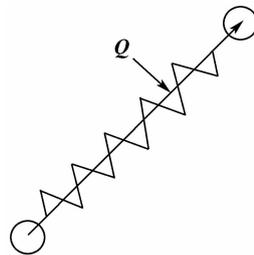


图 1 珠簧哑铃模型 (连接向量  $\mathbf{Q}$  表示哑铃构形)  
Fig. 1 Bead-spring dumbbell model (connector vector  $\mathbf{Q}$  describes configuration of model)

设  $H$  为弹性常数, 对 Hooke 哑铃模型

$$\mathbf{F} = H\mathbf{Q} \tag{6}$$

对 FENE (finitely extensible non-linear

elastic) 哑铃模型

$$\mathbf{F} = \frac{H}{1 - \left(\frac{Q}{Q_0}\right)^2} \mathbf{Q} \quad (7)$$

其中,  $Q_0$  为哑铃弹簧的最大拉伸长度。

对 FENE-P (Peterlin approximation) 哑铃模型

$$\mathbf{F} = \frac{H}{1 - \frac{\langle Q^2 \rangle}{Q_0}} \mathbf{Q} \quad (8)$$

式 (5) 两边同时除以  $\sqrt{kT/H}$ , 得到关于哑铃构形向量的量纲 1 化形式

$$d\mathbf{Q}'(t) = \left[ \boldsymbol{\kappa}(t) \cdot \mathbf{Q}'(t) - \frac{1}{2\lambda} \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{Q}') \right] dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} d\mathbf{W}(t) \quad (9)$$

其中,  $\mathbf{Q}' = \mathbf{Q} / \sqrt{H/kT}$ ;  $\lambda = \zeta/(4H)$ , 为哑铃的松弛时间。 $\tilde{\mathbf{F}}$  分别为

$$\tilde{\mathbf{F}} = \mathbf{Q}' \text{ (Hooke 哑铃)}$$

$$\tilde{\mathbf{F}} = \frac{\mathbf{Q}'}{1 - \langle Q'^2 \rangle / b} \text{ (FENE-P 哑铃)}$$

$$\tilde{\mathbf{F}} = \frac{\mathbf{Q}'}{1 - Q'^2 / b} \text{ (FENE 哑铃)}$$

其中,  $b$  为量纲 1 构形向量  $\mathbf{Q}'$  最大延伸长度的平方。

式 (5) 或式 (9) 描述了聚合物分子构形的运动, 是进行分子运动随机模拟的出发点。设  $\mathbf{Q}'_i$  表示  $\mathbf{Q}'(t)$  在  $t_i$  时的近似,  $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ , 采用显式的 Euler 格式, 式 (9) 的数值离散格式为

$$\mathbf{Q}'_{i+1} = \mathbf{Q}'_i + \left[ \boldsymbol{\kappa}_i \cdot \mathbf{Q}'_i - \frac{1}{2\lambda} \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{Q}'_i) \right] \Delta t + \sqrt{\frac{\Delta t}{\lambda}} \mathbf{W}_i \quad (10)$$

基于聚合物构形方程 (9), 量纲 1 聚合物应力  $\mathbf{T}^p$  由 Kramers 表达式给出

$$\mathbf{T}^p = nkT \langle \mathbf{Q}' \tilde{\mathbf{F}}(\mathbf{Q}') \rangle - nkT \mathbf{I} \quad (11)$$

其中,  $\mathbf{I}$  为单位矩阵,  $n$  为单位体积溶液的哑铃数。

### 3 径向点插值方法的近似原理

目前大多数无网格方法由于其构造的形函数不满足插值条件, 因而在施加本质边界条件时需要采取特殊的复杂的方法, 如拉格朗日乘子法、罚参数法与有限元方法耦合等<sup>[11-16]</sup>, 但径向点插值方法 (radial point interpolation method, RPIM) 构造的形函数满足插值条件, 可像有限元方法一样方便地施加本质边界条件, 所以本文选择 RPIM 进行宏观数值模拟。

径向基函数 (radical basis function, RBF) 是

一类以点  $\mathbf{x}$  到节点  $\mathbf{x}_i$  的距离  $d_i = \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|$  为自变量的函数。函数  $u(\mathbf{x})$  的近似函数  $u^h(\mathbf{x})$  可通过径向基函数表示为<sup>[13-14]</sup>

$$u^h(\mathbf{x}, \mathbf{x}_Q) = \sum_{I=1}^N a_I(\mathbf{x}_Q) \phi_I(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\Phi}^T(\mathbf{x}) \mathbf{a}(\mathbf{x}_Q) \quad (12)$$

其中,  $N$  为点  $\mathbf{x}$  影响域内的节点数,  $a_I(\mathbf{x}_Q)$  为  $\phi_I$  关于给定点  $\mathbf{x}_Q$  的待定系数,  $\phi_I$  为一径向基函数, 且

$$\mathbf{a} = [a_1 \quad a_2 \quad \cdots \quad a_N]^T$$

$$\boldsymbol{\Phi}(\mathbf{x}) = [\phi_1(\mathbf{x}) \quad \phi_2(\mathbf{x}) \quad \cdots \quad \phi_N(\mathbf{x})]^T$$

本文中采用的是 Multiquadrics (MQ) 径向基函数, 即  $\phi_I(\mathbf{x}) = (d_i + (\alpha_c d_c)^2)^q$ 。其中  $\alpha_c = 6.0$ ,  $q = 1.03$ , 对均匀布置的节点,  $d_c$  可取为相邻两节点的距离。

式 (12) 中系数向量  $\mathbf{a}$  由式 (13) 确定

$$\mathbf{a} = \boldsymbol{\Phi}_Q^{-1} \mathbf{U}_s \quad (13)$$

其中,  $\mathbf{U}_s = [u_1, u_2, \cdots, u_N]^T$  为点  $\mathbf{x}$  影响域内  $N$  个节点的场函数值向量,  $\boldsymbol{\Phi}_Q^{-1} = \boldsymbol{\Phi}^{-1}(\mathbf{x}_Q)$ 。

将式 (13) 代入式 (12) 得

$$u^h(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\Phi}^T(\mathbf{x}) \boldsymbol{\Phi}_Q^{-1} \mathbf{U}_s = \mathbf{N}(\mathbf{x}) \mathbf{U}_s \quad (14)$$

其中,  $\mathbf{N}(\mathbf{x}) = \boldsymbol{\Phi}^T(\mathbf{x}) \boldsymbol{\Phi}_Q^{-1}$  为 RPIM 的形函数。由于径向基函数满足插值条件, 即形函数  $N_I(\mathbf{x}_J) = \delta_{IJ}$ , 因此很容易施加本质边界条件。又由于 RPIM 在每个节点的紧支域内构造形函数, 因此 RPIM 形函数也具有紧支性, 所以 RPIM 方法和其他无网格方法 (如 EFG 方法等) 一样, 形成的刚度矩阵是带状、稀疏矩阵。

### 4 宏观-微观方法

为了叙述说明的方便, 作者以平面突然起动的 Couette 流<sup>[2]</sup> (如图 2) 为例来阐述本文 CVFMFSS 方法的基本思想和实现过程。在  $t < 0$ , 流场处于静止状态; 当  $t = 0$  时, 下平板开始以常速度  $u = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  移动, 且假设壁面边界满足无滑移条件。

速度场假设为  $u = u(y, t)$ ,  $v = 0$ ,  $w = 0$ 。显然它们自动满足不可压缩流的连续性方程。在本问题中, 压力场可不必计算, 因此动量守恒方程可写为

$$\rho \frac{\partial u}{\partial t} = \eta_s \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial \tau_{yx}^e}{\partial y}(y, t) \quad (15)$$

以 Hooke 哑铃模型为例, 对平面突然起动的 Couette 流, 随机微分方程 (9) 可写为

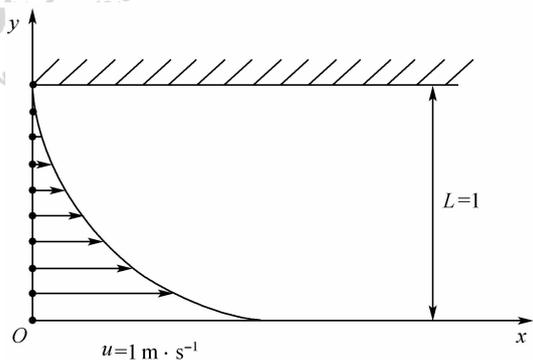


图 2 平面突然起动 Couette 流问题

Fig. 2 Start-up planar Couette flow problem (at time  $t=0$ , lower plate begins to move with a constant speed  $u$ , upper plate is fixed)

$$dp(y, t) = \left( \frac{\partial u}{\partial y} q(t) - \frac{1}{2\lambda} p(y, t) \right) dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dV(t) \quad (16)$$

$$dq(t) = -\frac{1}{2\lambda} q(t) dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dW(t) \quad (17)$$

其中,  $p(y, t)$  和  $q(t)$  分别表示哑铃在水平和垂直方向上的拉伸,  $V$  和  $W$  为两相互独立的标准 Wiener 过程。对 Hooke 哑铃模型, 聚合物剪切应力表达式为

$$\tau_{yx}^p = nkT \langle p(y, t) q(t) \rangle \quad (18)$$

本文 CVFMFSS 方法的基本思想是应用无网格方法离散式 (1) 和式 (4), 用 Monte Carlo 方法近似聚合物对应力的贡献  $\mathbf{T}^p$ , 即式 (11)。对平面突然起动 Couette 流和 Hooke 哑铃模型, 应用本文提出的 CVFMFSS 方法, 其对应的离散形式分别为

$$\frac{\rho}{\Delta t} \int_y (u^{n+1} - u^n) \omega = -\eta_s \int_y \frac{\partial u^{n+1}}{\partial y} \frac{\partial \omega}{\partial y} - \int_y \tau_{yx}^n \frac{\partial \omega}{\partial y} \quad (19)$$

$$\tau_i^{n+1} = \frac{nkT}{J} \sum_{j=1}^J p_{ij}^{n+1} q_j^{n+1} \quad (20)$$

其中,  $J$  为随机变量的样本数。

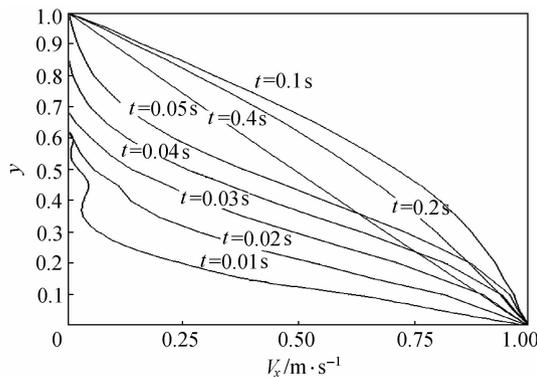
## 5 数值算例及结果分析

### 5.1 平面突然起动 Couette 流

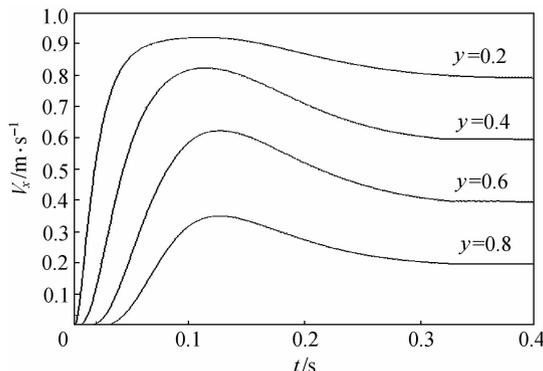
在本节算例中, 21 个节点均匀布置在区间  $[0, 1]$  上, 整个区域被划分为 20 个背景网格 (背景网格和节点无任何关系, 它仅用于数值积分, 一般均使用比较规则的背景网格。与有限元相比, 背景网格的生成比有限元网格的生成要容易得多), 每个背景网格内采用二阶高斯积分。

5.1.1 Hooke 哑铃模型 对 Hooke 哑铃模型, 可导出和其相对应的封闭的本构方程 (如 Oldroyd-B

流体本构方程)。Laso 和 Öttinger 对 Hookean 哑铃, 应用 CONNFESSIT 方法模拟了突然起动的平面 Couette 流。为了和其进行比较, 本文采用了同样的模型参数, 即  $\lambda=0.1 \text{ s}$ ,  $nkT=8.8$ ,  $\rho=0.11 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ,  $\eta_s=0.11 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ , 但在本算例中采用了较大的时间步长  $\Delta t=0.005 \text{ s}$  (文献 [2] 中  $\Delta t=0.0001 \text{ s}$ ) 和较少的哑铃数 (文献 [2] 中哑铃数为 750000) 及节点数, 每个节点上布置 10000 个哑铃分子。图 3 (a) 给出了在不同时刻的速度分布情况, 由图可见速度过冲现象。同时从图中可看出在  $t=0.01 \text{ s}$  时, 速度有微小振荡, 这主要是由于 RPIM 离散带来的随机噪声造成的, 但与文献 [2] 相比, 本文结果明显优于应用 CONNFESSIT 方法求解的结果。图 3 (b) 给出了平板间不同位置 ( $y=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ ) 随时间的速度变化情况。从图中同样可见速度过冲现象, 且和文献 [2] 结果比较接近。



(a) velocity profile with respect to location  $y$  at different times



(b) velocity at four locations in channel ( $y=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ ) as function of time

图 3 对 Hooke 哑铃模型, 平面突然起动 Couette 流的速度变化情况

Fig. 3 Velocity of planar Couette flow problem for Hookean model

5.1.2 FENE 哑铃模型 由于 FENE 模型的非线性，目前还没有与之对应的封闭的本构方程，通常要通过适当的近似才能使其封闭。类似 Hooke 哑铃模型，对 FENE 哑铃，随机微分方程 (9) 可写为

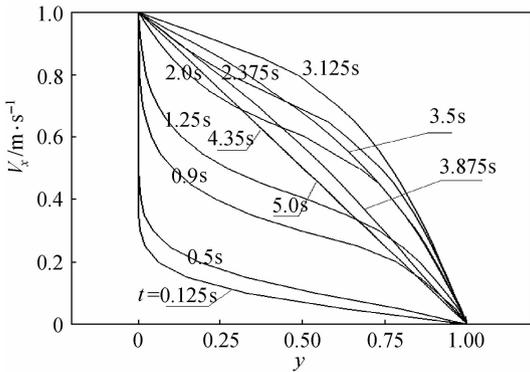
$$dp(y,t) = \left( \frac{\partial u}{\partial y} q(y,t) - \frac{1}{2\lambda} \frac{p(y,t)}{1 - (p^2(y,t) + q^2(y,t))/b} \right) dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dV(t) \quad (21)$$

$$dq(y,t) = -\frac{1}{2\lambda} \frac{q(y,t)}{1 - (p^2(y,t) + q^2(y,t))/b} dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dW(t) \quad (22)$$

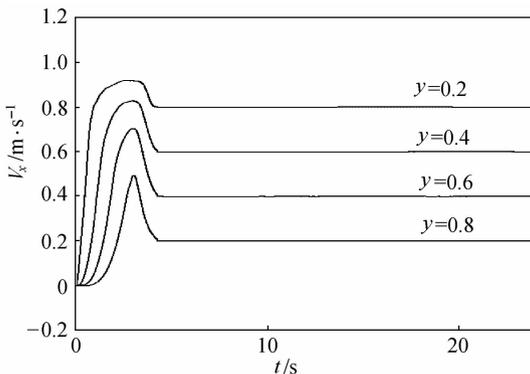
对应的聚合物剪切应力表达式为

$$\tau_{xy}^p = nkT \left\langle \frac{p(y,t)q(y,t)}{1 - (p^2(y,t) + q^2(y,t))/b} \right\rangle \quad (23)$$

同样为了和文献 [2] 的结果相比较，除了时间步长选取更大 (文献 [2] 中  $\Delta t = 0.0001$  s) 和节点更稀外，其他模型参数均一样，即  $\lambda = 49.62$  s,  $\rho = 1.2757 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ,  $\eta_s = 0.0521 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ ,  $b =$



(a) velocity profile with respect to location  $y$  at different times



(b) velocity at four locations in channel ( $y=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ ) as function of time

图 4 对 FENE 哑铃模型，平面突然起动 Couette 流的速度变化情况

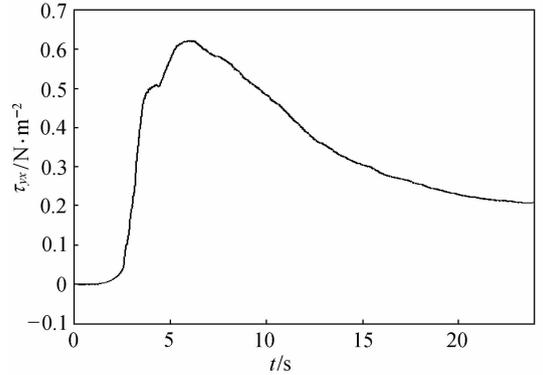
Fig. 4 Velocity of planar Couette flow problem for FENE model

50。在此算例中，每个节点上布置 2500 个哑铃分子。图 4 (a) 和 (b) 分别给出了在不同时刻速度演化情况和速度在  $y=0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  位置处随时间的变化情况。由图可见，与文献 [2] 的结果吻合很好，溶液大约在  $t=4.3$  s 时达到稳定状态。图 5 (a) 和 (b) 分别给出了上平板处 ( $y=1.0$ ) 聚合物剪切应力和第一法向应力差随时间的变化。由图可见，其分布情况和文献 [2] 的结果基本一致。从而说明 CVFMFSS 方法可以准确地预测应力分布。

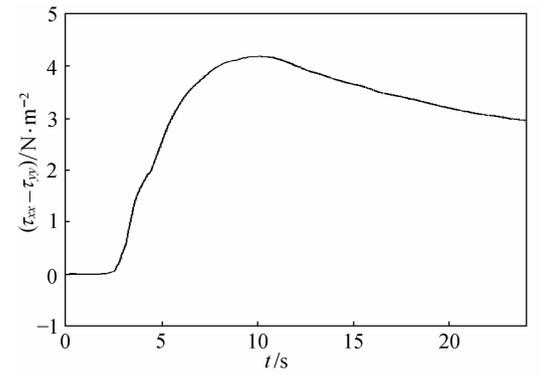
5.1.3 FENE-P 哑铃模型 FENE-P 哑铃模型是对 FENE 哑铃进行 Peterlin 近似得到的。对 FENE-P 哑铃模型，其相应的随机微分方程为

$$dp(y,t) = \left[ \frac{\partial u}{\partial y} q(y,t) - \frac{1}{2\lambda} \frac{p(y,t)}{1 - \langle Q^2 \rangle / b} \right] dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dV(t) \quad (24)$$

$$dq(y,t) = -\frac{1}{2\lambda} \frac{q(y,t)}{1 - \langle Q^2 \rangle / b} dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dW(t) \quad (25)$$



(a) evolution of shear stress at location  $y=1.0$



(b) evolution of the first normal stress difference at location  $y=0.1$

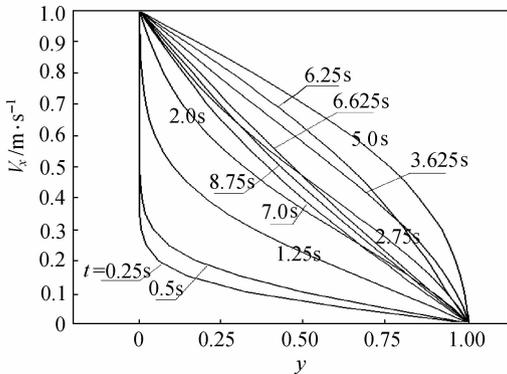
图 5 对 FENE 哑铃模型，平面突然起动 Couette 流上平板的剪切应力及第一法向应力差的演化图

Fig. 5 Stress of planar Couette flow problem for FENE model

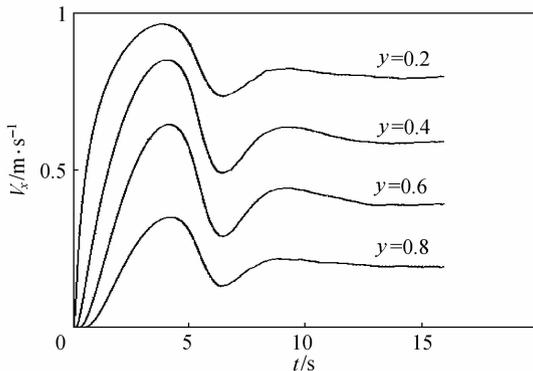
对应的聚合物剪切应力表达式为

$$\tau_{yx}^p = nkT \left( \frac{\rho(y,t)q(y,t)}{1 - \langle Q^2 \rangle / b} \right) \quad (26)$$

同样, 本算例的模型参数和文献 [2] 一样, 即  $\lambda = 49.62 \text{ s}$ ,  $\rho = 1.2325 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ ,  $\eta_s = 0.050332 \text{ Pa} \cdot \text{s}$ ,  $b = 50$ 。其他与 FENE 哑铃模型中的计算参数一样。图 6 (a) 和 (b) 分别给出了在不同时刻速度演化情况和速度在  $y = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$  位置处随时间的变化情况。从图中可看出速度过冲现象。由图 6 (b) 还可看出速度振荡, 这和文献 [2] 是类似的, 但没有文献 [2] 的速度振荡现象突出。图 7 (a) 和 (b) 分别给出了上平板处 ( $y = 1.0$ ) 聚合物剪切应力和第一法向应力差随时间的变化。由图可见, 聚合物剪切应力和第一法向应力差均未出现振荡现象, 这和文献 [2] 是有差别的。主要原因是由于无网格方法通常可得到光滑



(a) velocity profile with respect to location  $y$  at different times

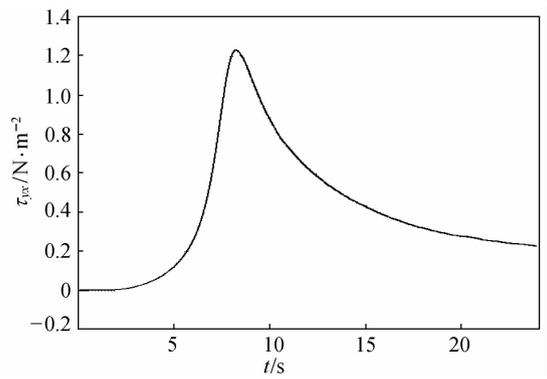


(b) velocity at four locations in channel

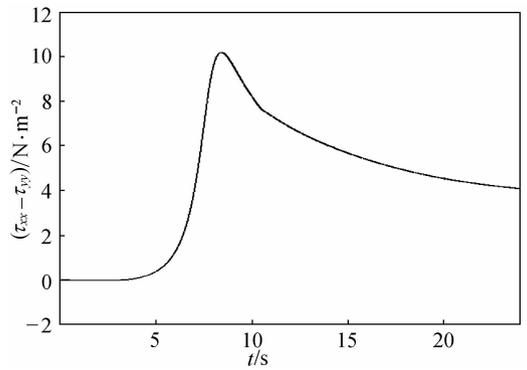
( $y = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8$ ) as function of time

图 6 对 FENE-P 哑铃模型, 平面突然起动 Couette 流的速度变化情况

Fig. 6 Velocity of planar Couette flow problem for FENE-P model



(a) evolution of shear stress at location  $y = 1.0$



(b) evolution of the first normal stress difference at location  $y = 1.0$

图 7 对 FENE-P 哑铃模型, 平面突然起动 Couette 流上平板的剪切应力及第一法向应力差的演化图

Fig. 7 Stress of planar Couette flow problem for FENE-P model

的应力分布, 而有限元方法需要采用特殊处理。结合图 5 (a) 和 (b), 从图 7 中还可看出 FENE-P 哑铃模型的聚合物剪切应力最大值和第一法向应力差最大值分别对应 FENE 哑铃模型的 2 倍左右, 这与文献 [2] 预测的结果一致。

### 5.2 方腔驱动流

方腔驱动流是计算流体和传热学中的典型算例, 但很少关于聚物流动的数值结果。Tran-Cong 等<sup>[18]</sup>应用神经网络耦合随机模拟方法模拟了稳态的等温的方腔驱动聚合物蠕变流动问题。许多工业应用中都会遇到聚合物的蠕变流动问题。本文方腔长宽各为 1 个单位, 方腔上边界以恒定速度  $u = 1 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  向右运动, 其他边界上的速度值为零, 由于在大多数低 Reynolds 数聚物流动中, 非线性的对流项可以忽略, 因此控制方程为

$$\nabla \cdot \mathbf{u} = 0 \quad (27)$$

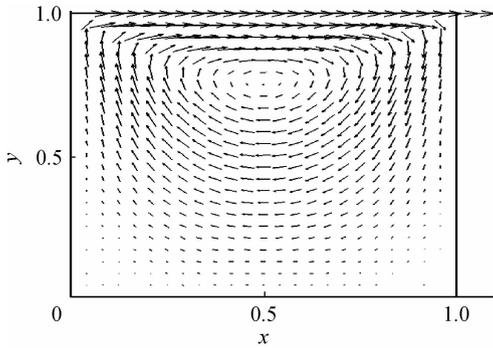
$$-\nabla P + \nabla \cdot \mathbf{T} = 0 \quad (28)$$

为了减少未知量的个数，采用罚函数法来耦合压力和速度，即  $P = -\gamma \nabla \cdot \mathbf{u}$ ，其中罚参数  $\gamma$  是一个非常大的常数，一般取为  $10^6 \sim 10^9$ ，本文取为  $10^7$ 。于是式 (28) 对应的积分弱形式为

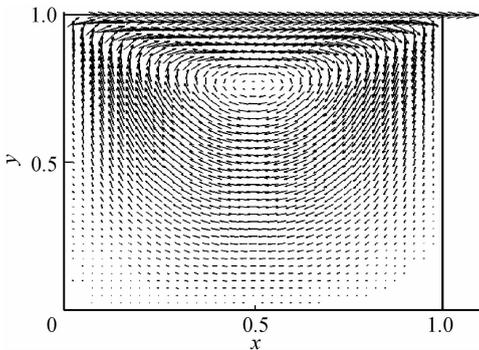
$$\int_{\Omega} \gamma (\nabla \cdot \mathbf{N}_i) (\nabla \cdot \mathbf{u}) d\Omega + \int_{\Omega} \eta_s (\nabla \mathbf{N}_i) : (\nabla \mathbf{u} + (\nabla \mathbf{u})^T) d\Omega = - \int_{\Omega} \mathbf{T}^P : \nabla \mathbf{N}_i d\Omega + \int_{\Gamma} \mathbf{N}_i \cdot \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{n} d\Gamma \quad (29)$$

其中， $\boldsymbol{\sigma} = -\mathbf{P}\mathbf{I} + \mathbf{T}$ 。注意在对含有  $\gamma$  的项进行数值积分时，要应用积分降阶技术。在本算例中，在每个背景网格内对不包含  $\gamma$  的项采用  $5 \times 5$  高斯积分，而对含有  $\gamma$  的项采用  $1 \times 1$  高斯积分。为了和文献 [18] 结果比较，本算例仅考虑 Hooke 哑铃模型。

图 8 给出了  $25 \times 25$  个节点和  $41 \times 41$  个节点的速度场，其中每个节点上布置 1000 个哑铃分子，哑铃分子的松弛时间  $\lambda = 1$  s，Deborah 数  $De = 1.0$ 。从图中可见原始涡位于方腔的上游，与文献 [18] 的结果相吻合。图 9 给出了不同节点数 (625 和 1681)，CVFMFSS 方法计算的方腔垂直中心线上的  $u$  曲线和水平中心线上的  $v$  曲线。由图可见，



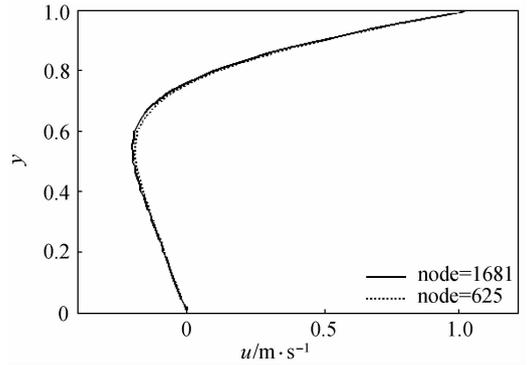
(a)  $25 \times 25$  nodes



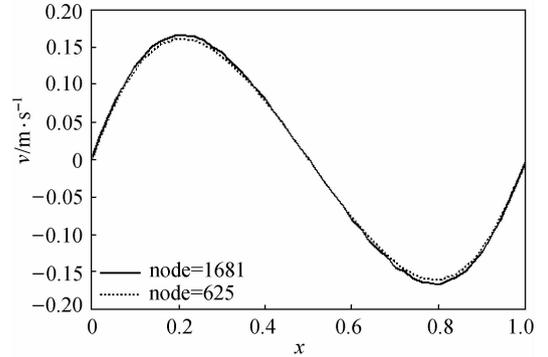
(b)  $41 \times 41$  nodes

图 8 对 Hooke 哑铃模型，方腔驱动流的速度场

Fig. 8 Velocity field of lid-driven square cavity flow problem for Hookean dumbbell model



(a) profile of velocity component  $u$  on horizontal central plane



(b) profile of velocity component  $v$  on vertical central plane

图 9 对 Hooke 哑铃模型，中轴的速度曲线

Fig. 9 For Hookean dumbbell model, comparison of mid-axial planes velocity for different nodes

不同节点数时，中心轴线上的速度几乎重合，同时中心轴线上的速度也与文献 [18] 的结果相一致，从而说明了 CVFMFSS 方法计算结果的可靠性。

## 6 结 论

基于 CONNFESSIT 方法的基本思想，本文提出了直接耦合无网格方法和 Brown 动力学模拟聚物流体的多尺度计算方法，即 CVFMFSS 方法。应用 CVFMFSS 方法求解了平面突然起动的 Couette 流和方腔驱动流，验证了该方法的有效性和鲁棒性，结果表明该方法继承了 CONNFESSIT 方法的优点：

- (1) 不需要封闭的本构方程，从而可以处理更加复杂的聚物流体模型；
- (2) 可容易在不同聚合物模型中转换，程序编制简单；
- (3) 从物理上看，在边界条件的处理上更加准

确地刻画了实际流体的边界。

另外, 由于宏观尺度采用无网格方法求解, CVFMFSS 方法还具有无网格方法的一些优良特性, 如不需要前处理过程, 避免了繁琐的网格生成, 容易添加和删除节点, 得到的应力通常是光滑的等。

和传统数值方法相比, CVFMFSS 方法的最大缺点是计算量大。在保障计算精度的情况下, 目前如何减少该方法的计算量仍然是一个亟待解决的问题。

### 符 号 说 明

- $b$ ——量纲 1 构形向量  $Q'$  最大延伸长度的平方  
 $F$ ——弹簧力, N  
 $H$ ——弹簧常数,  $N \cdot m^{-1}$   
 $I$ ——单位张量  
 $J$ ——每个节点的样本个数  
 $k$ ——Boltzmann 常数,  $J \cdot K^{-1}$   
 $n$ ——哑铃的数密度,  $m^{-3}$   
 $P$ ——压力, Pa  
 $p, q$ ——构形向量分量  
 $Q$ ——哑铃构形向量  
 $T$ ——绝对温度, K  
 $T$ ——溶液的偏应力张量,  $N \cdot m^{-2}$   
 $T^p$ ——聚合物应力张量,  $N \cdot m^{-2}$   
 $T^s$ ——Newtonian 溶剂应力张量,  $N \cdot m^{-2}$   
 $\Delta t$ ——时间步长, s  
 $u$ ——速度向量,  $m \cdot s^{-1}$   
 $u, v, \omega$ ——速度分量,  $m \cdot s^{-1}$   
 $W$ ——标准的 Wiener's 过程  
 $V, W$ ——标准正态分布随机数  
 $\delta_{ij}$ ——Kronecker delta 符号  
 $\zeta$ ——珠的阻力系数,  $N \cdot s \cdot m^{-1}$   
 $\eta_s$ ——溶剂黏度,  $Pa \cdot s$   
 $\kappa$ ——速度梯度张量的转置  
 $\lambda$ ——松弛时间, s  
 $\rho$ ——流体密度,  $kg \cdot m^{-3}$   
 $\tau_{yx}, \tau_{yx}^p$ ——剪切应力,  $N \cdot m^{-2}$   
 $\tau_{xx} - \tau_{yy}$ ——第一法向应力差,  $N \cdot m^{-2}$   
 $\langle \rangle$ ——系综平均

### References

- [1] Owens R G, Phillips T N. Computational Rheology. London: Imperial College Press, 2002
- [2] Laso M, Öttinger H C. Calculation of viscoelastic flow using molecular models; the CONNFESSIT approach. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 1993, **47**: 1-20
- [3] Öttinger H C. Stochastic Processes in Polymeric Fluids. Berlin: Springer, 1996
- [4] Feigl K, Laso M, Öttinger H C. CONNFESSIT approach for solving a two-dimensional viscoelastic fluid problem. *Macromolecules*, 1995, **28**: 3261-3274
- [5] Hu Xin, Ding Zhongman, Lee L James. Simulation of 2D transient viscoelastic flow using the CONNFESSIT approach. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 2005, **127**: 107-122
- [6] Bonvin John, Picasso Marco. Variance reduction methods for CONNFESSIT-like simulations. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 1999, **84**: 191-215
- [7] Fang Jiannong (方建农), Fan Yurun (范毓润), Fan Xijun (范西俊), Dai Zhiqian (戴志潜). Numerical simulation of polymeric flow based on molecular models. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 1997, **48** (3): 264-269
- [8] Fang Jiannong (方建农), Fan Xijun (范西俊). Brownian dynamics simulation of freely rotating bead-rod chain model. *Journal of Chemical Industry and Engineering (China)* (化工学报), 1997, **48** (4): 395-400
- [9] E W, Li T J, Zhang P W. Convergence of a stochastic method for the modeling of polymeric fluids. *Acta Mathematica Applicatae Sinica, English Series*, 2002, **18** (4): 529-536
- [10] Li T J, Vanden-Eijnden E, Zhang P W, E W. Stochastic models of polymeric fluids at small Deborah number. *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, 2004, **121**: 117-125
- [11] Belytschko T, Krongauz Y, Organ D, Fleming M, Krysl P. Meshless method: an overview and recent developments. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.*, 1996, **139** (1/2/3/4): 3-47
- [12] Atluri S N, Zhu T. A new meshless local Petrov-Galerkin (MLPG) approach in computational mechanics. *Comput. Mech.*, 1998, **22** (2): 117-127
- [13] Liu G R, Dai K Y, Lim K M, Gu Y T. A point interpolation meshfree method for simulation of two-dimensional piezoelectric structures. *Smart Materials and Structures*, 2003, **12**: 171-180
- [14] Liu G R, Gu Y T. An Introduction to Meshfree Methods and Their Programming. Dordrecht: Springer, 2005
- [15] Zhang Xiong (张雄), Liu Yan (刘岩). Meshless Methods (无网格法). Beijing: Tsinghua University Press, 2004
- [16] Liu Geng (刘更), Liu Tianxiang (刘天祥). Meshfree Methods and Their Applications (无网格法及其应用). Xi'an: Northwestern Polytechnical University Press, 2005
- [17] Bird R, Curtiss C, Armstrong R, Hassager O. Dynamics of Polymeric Liquids. New York: Wiley, 1987
- [18] Tran-Canh D, Tran-Cong T. Element-free simulation of dilute polymeric flows using Brownian configuration fields. *Korea-Australia Rheology Journal*, 2004, **16** (1): 1-15