

研究论文

嵌件平板收缩流支化聚合物黏弹 行为的数值模拟

赵智峰, 欧阳洁, 张 玲, 刘德峰
(西北工业大学理学院, 陕西 西安 710072)

摘要: 选取基于 Doi-Edwards 模型发展起来的 XPP 模型作为聚合物浓厚体系的本构关系, 采用同位网格有限体积法结合数值求解的稳定化技术首先对 4 : 1 平板收缩流进行了全域模拟, 而后对聚合物成型中常见的嵌件收缩流进行了模拟。得出了 4 : 1 平板收缩流和嵌件收缩流中流函数、拉伸量、第一法向应力差、第二法向应力差等值线的变化趋势, 讨论了嵌件对聚合物浓厚体系行为的影响。数值结果表明, 随着嵌件中心位置的变化, 聚合物宏观信息表征量发生明显的变化, 特别是收缩区上游拐角处涡的大小、形状以及嵌件后侧到收缩处拉伸量的变化非常显著。

关键词: XPP 模型; 同位网格; 嵌件; 4 : 1 平板收缩流; 法向应力差

中图分类号: O 373

文献标识码: A

文章编号: 0438-1157 (2008) 04-0843-08

Numerical simulation of branched polymer melts through planar contraction with inset based on XPP model

ZHAO Zhifeng, OUYANG Jie, ZHANG Ling, LIU Defeng

(College of Science, Northwestern Polytechnical University, Xi'an 710072, Shaanxi, China)

Abstract: The finite volume method in the non-staggered grid was applied to the prediction of the two-dimensional branched polymer melts through a 4 : 1 planar contraction and planar contraction with inset. The constitutive equation followed the extended pom-pom model (XPP model), which was developed from the Doi-Edwards model based on the rheology molecular theory. The decoupling about velocity-pressure and velocity-stress was removed by a new interpolation technique inspired by that of Rhie and Chow. Moreover, some numerical terms were added in order to promote the stability of the finite volume schemes. With the help of contour about stream function, backbone stretch, the first normal stress difference and the second normal stress difference, the development tendency of the polymer melts in 4 : 1 planar contraction and planar contraction with inset was presented. The influence of inset on viscoelasticity of concentrated liquids was also discussed in detail. The numerical result indicated that the quantities describing viscoelasticity of polymer melts, especially for the size and shape of the salient corner vortex and backbone stretch behind inset, had obvious changes if the central position of inset was different.

Key words: XPP model; non-staggered grid; inset; 4 : 1 planar contraction; normal stress difference

2007-08-06 收到初稿, 2007-12-06 收到修改稿。

联系人: 欧阳洁。第一作者: 赵智峰 (1981—), 男, 硕士研究生。

基金项目: 国家重点基础研究发展计划项目 (2005CB321704); 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: 2007-08-06.

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

Foundation item: supported by the National Basic Research Program of China (2005CB321704), the National Natural Science Foundation of China (10590353) and the Natural Science Foundation of Shaanxi Province (2005A16).

引 言

在聚合物成型过程中, 流体常常需要流经由互不相同管道连接而成的流道。在一些特定的模具成型中, 流道中还包含一些形状各异的嵌件。工程实践表明: 在嵌件附近以及流道发生变化的地方, 聚合物溶液的流动行为会产生明显变化, 从而导致具有复杂流变行为的流体特性变得更加复杂。因此, 实验模拟或解析求解收缩流道或具有嵌件流道的流动都比较困难, 特别是聚合物浓厚体系。随着计算流体力学的发展, 对复杂流道内聚合物溶液流动的数值模拟日益活跃。要准确模拟聚合物在复杂流道内的流动, 关键在于寻求可以合理描述聚合物溶液对非线性响应规律的本构方程^[1-2]。相比于唯象性方法, 分子论方法建立的本构模型更能真实地反映聚合物在应变历程中的力学响应。近年来, 基于分子论建立的本构模型, 如哑铃模型、珠-簧模型、滑结网模型等^[3-4], 在聚合物稀溶液研究中应用非常广泛。而在聚合物浓厚体系中, 构建能够合理描述大分子链缠结效应的本构方程比较困难, 特别是考虑支化链对分子链缠结效应的影响时。本文选取在聚合物浓厚体系研究中发展迅速的 XPP 模型^[5] (extended pom-pom model) 作为本构方程。XPP 模型是 Mcleish 等^[6] 基于 Doi-Edwards 蠕虫模型建立的 PP 模型 (pom-pom model) 的修正模型。该模型不仅可以合理地描述聚合物浓厚体系剪切和拉伸行为, 而且一定程度上克服了应力奇点的问题, 使可计算的 Weissenberg 数更大。

有限元法和有限体积法是目前数值模拟聚合物溶液流动的主要方法。相比有限元法, 有限体积法具有存储少、计算耗时短等诸多优点, 因而, 近年来在黏弹性流体的数值模拟中应用广泛。基于交错网格的有限体积法^[7] 为解决速度、压力以及速度、应力耦合, 通常需要三套网格来存储变量, 导致其实施非常烦琐; 而利用动量插值技术解决速度、压力以及速度、应力耦合的同位网格有限体积法, 只需要一套网格来存储变量。该方法由于实施简单而受到许多研究者的推崇^[8-9], 但基于 XPP 模型作为流体的本构方程, 采用同位网格有限体积法进行数值模拟的报道很少。

本文首先采用同位网格有限体积法结合数值稳定化技术对 XPP 模型的 4:1 平板收缩流进行了全域模拟, 通过分析流函数、拉伸量、第一法向应力

差以及第二法向应力差的等值线图以验证该算法的有效性。并且, 本文也基于 XPP 模型, 应用同位网格有限体积法模拟了嵌件中心放置以及嵌件单侧放置时的平板收缩流, 得出了表征聚合物浓厚体系宏观信息的流函数、拉伸量、第一法向应力差以及第二法向应力差在嵌件流道中的等值线图, 讨论了嵌件对聚合物浓厚体系行为的影响。

1 控制方程组及数值方法

假定流动是二维稳态不可压缩浓厚体系, 本构方程由 XPP 模型^[6,10-11] 给定。为增强计算稳定性, 在动量方程两端添加黏性项; 在本构方程中增加 $-\frac{2}{3}\mu_s \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \delta_{ij}$ 项^[8-9]。对修正后的控制方程进行量纲 1 化^[10-11], 选取量纲 1 参数如下

$$We = \frac{\lambda_{ob} U}{L}, Re = \frac{\rho U L}{\mu}$$

$$\beta = \frac{\mu_s}{\mu_s + G_0 \lambda_{ob}}, \epsilon = \frac{\lambda_{os}}{\lambda_{ob}}, \mu = \mu_s + G_0 \lambda_{ob}$$

其中, U 、 L 是特征速度和特征尺度, u_k 为速度分量, δ_{ij} 为单位算子, ρ 为流体密度, G_0 为剪切模量, λ_{os} 、 λ_{ob} 是分子链收缩松弛时间和取向松弛时间, μ_s 是牛顿溶剂黏度, μ 是总黏度, Re 表示惯性力与黏性力的比, We 表示弹性力和黏性力的比, β 表示牛顿黏度和总黏度的比, ϵ 表示分子链的收缩松弛时间和取向松弛时间比。量纲 1 方程可以写成如下标准形式

$$\nabla \cdot (m u \phi) - \nabla \cdot (\Gamma \nabla \phi) = S_\beta \quad (1)$$

式 (1) 中各个方程的系数表达式如表 1 所示。表 1 中的 u 、 v 为流体沿 x 方向和 y 方向上的速度分量; p 为流体的静压力; τ_{xx} 、 τ_{xy} 、 τ_{yy} 、 τ_{zz} 为聚合物偏应力分量; α 是与聚合物各向异性相关的参数; q 是与支化聚合物分子链相关的参数, 表示分子主链末端连接“臂”的个数; λ 表示拉伸的量。表 1 中 $f(\lambda, \tau)$ 、 λ 、 v 的计算表达式见文献 [10-11]。

本文采用同位网格有限体积方法离散控制方程式 (1), 在计算中, 将速度、压力以及应力等变量置于同一套网格中。采用动量插值技术^[8-9] 处理速度、压力以及速度、应力的耦合。由本构方程求解节点应力, 利用动量插值技术来求得界面应力, 将应力梯度作为动量方程的源项求解节点速度。具体计算过程采用协调一致的 SIMPLE (semi-implicit method for pressure linked equations) 算法, 即 SIMPLEC 算法^[12] 来求解离散控制方程组。

表 1 标准控制方程参数表

Table 1 Definition of constants and functions in general equation

Equation	m	ϕ	Γ	S_p
continuity	1	1	0	0
u -momentum	Re	u	1	$-\frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial y} + (\beta - 1) \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right)$
v -momentum	Re	v	1	$-\frac{\partial p}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yy}}{\partial y} + (\beta - 1) \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right)$
τ_{xx} normal stress	We	τ_{xx}	0	$\left(\frac{4}{3} - 2\beta \right) \frac{\partial u}{\partial x} + 2We\tau_{xx} \frac{\partial u}{\partial x} + 2We\tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial y} - f(\lambda, \tau)\tau_{xx} - [f(\lambda, \tau) - 1] \frac{1-\beta}{We} - \alpha \frac{We}{1-\beta} (\tau_{xx}^2 + \tau_{xy}^2) - \frac{2}{3} \frac{\partial v}{\partial y}$
τ_{xy} shear stress	We	τ_{xy}	0	$(1-\beta) \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) + We\tau_{xy} \frac{\partial u}{\partial x} + We\tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial y} + We\tau_{xx} \frac{\partial v}{\partial x} + We\tau_{yy} \frac{\partial u}{\partial y} - f(\lambda, \tau)\tau_{xy} - \alpha \frac{We}{1-\beta} \tau_{xy} (\tau_{xx} + \tau_{yy})$
τ_{yy} normal stress	We	τ_{yy}	0	$\left(\frac{4}{3} - 2\beta \right) \frac{\partial v}{\partial y} + 2We\tau_{yy} \frac{\partial v}{\partial y} + 2We\tau_{xy} \frac{\partial v}{\partial x} - f(\lambda, \tau)\tau_{yy} - [f(\lambda, \tau) - 1] \frac{1-\beta}{We} - \alpha \frac{We}{1-\beta} (\tau_{yy}^2 + \tau_{xy}^2) - \frac{2}{3} \frac{\partial u}{\partial x}$
τ_{zz} stress	We	τ_{zz}	0	$-f(\lambda, \tau)\tau_{zz} - [f(\lambda, \tau) - 1] \frac{1-\beta}{We} - \alpha \frac{We}{1-\beta} \tau_{zz}^2$

2 数值算例和结果讨论

4 : 1 平板收缩流能够反映流体经剪切和拉伸变形后的各种特性，并且在聚合物挤出、注塑成型过程以及石油输送等领域有着广泛的应用。因此，本文对图 1 所示的平板收缩流进行模拟。边界设定为^[9,11]：在入口处速度和应力给定，出口处在流场充分发展的假设下采用 Neumann 边界条件；固壁设定为无滑移边界条件；为使流场在出口充分发展，取收缩下游管道长度 $L_2 = 20H_2$ ，取上游管道长度 $L_1 = 10H_2$ 。其中 H_2 是特征长度。计算中本文采用了疏密不同的 3 套网格，每一套网格都是拼片式网格^[9]，其中各片的网格数如表 2 所示，量纲 1 参数的选取如下： $We = 10.0$ ， $Re = 1.0$ ， $\beta = 1.0/9.0$ ， $\alpha = 0.15$ ， $q = 2$ ， $\epsilon = 1.0/3.0$ ， $H_1/H_2 = 4$ 。

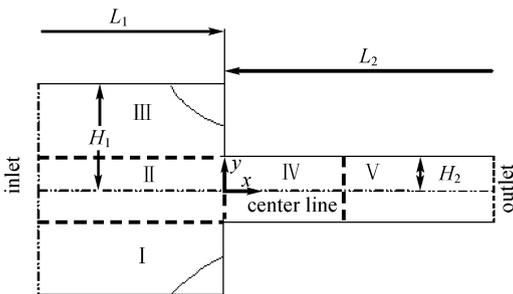


图 1 4 : 1 平板收缩流模拟区域示意图

Fig. 1 Geometry of 4 : 1 planar contraction

2.1 收缩流行为分析及算法验证

图 2 是基于网格 1 和网格 2 的计算结果对比

表 2 网格参数

Table 2 Mesh characteristic parameters

Mesh	Mesh 1	Mesh 2	Mesh 3
I	320 × 120	160 × 60	80 × 30
II	320 × 40	160 × 20	80 × 10
III	320 × 120	160 × 60	80 × 30
IV	120 × 40	60 × 20	30 × 10
V	80 × 40	40 × 20	20 × 10

图，由图可见，加密网格对计算结果的影响很小。作者在计算中发现，基于网格 3 和基于网格 1、2 的计算结果除在上游拐角处略有差别外，其他计算区域相吻合。综合计算量和计算精度，本文在后续计算中全部采用网格 2。

由图 2 可以看出，虽然采取了全域模拟，但表征聚合物宏观信息的量仍关于 4 : 1 收缩流中轴线 ($y=0$) 对称。所以对称流动可以采取对称中轴边界而模拟一半区域。但当收缩上游区域里有单侧放置的嵌件时，流场将不再具有对称性，就必须采取全域模拟。通过与文献 [11] 中模拟结果对比后发现，图 2 中表征聚合物宏观信息的各个量不仅变化趋势与文献 [11] 相同，而且数值也相吻合。这说明本文采用的同位网格有限体积分流体的模拟结果可靠。

图 2 (a) 是流函数等值线，由图可以看出，在靠近壁面且远离拐角的区域，流动以剪切为主；在接近中轴线的位置，主要是拉伸流动；而在上游拐角区域，流动比较复杂，以旋转为主并形成涡。图 2 (b) 是拉伸量 λ 的等值线图。由图可以看出，

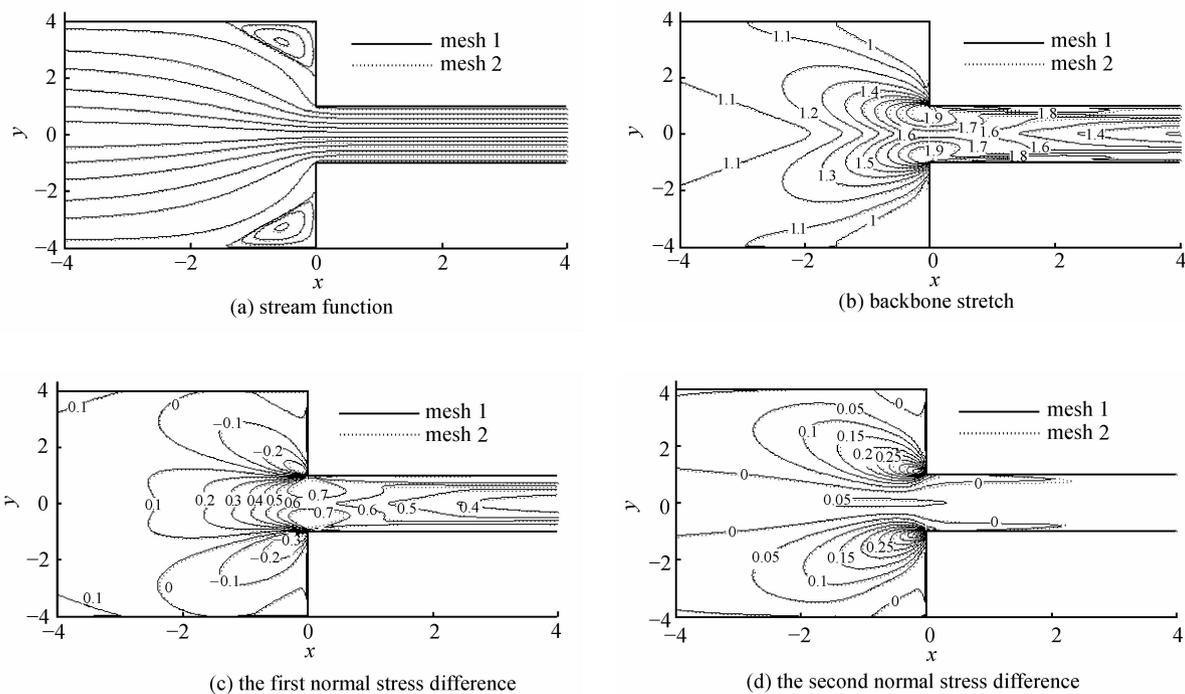


图 2 收缩流聚合物宏观表征量

Fig. 2 Viscoelasticity quantities in 4 : 1 planar contraction

在收缩区上游，拉伸量 λ 可分成 3 部分^[13-14]，即在远离收缩处的中轴线附近和角涡附近的非拉伸区域以及夹在这两个非拉伸区域中间的强拉伸区域。两个非拉伸区域呈现一种“楔形”，在这楔形的非拉伸区域里拉伸量 λ 的变化很小且数值上非常接近 1.0。而夹在非拉伸区域中间的强拉伸区域也呈现一种“楔形”。在楔形强拉伸区域里拉伸量 λ 变化很剧烈。拉伸量 λ 在接近收缩处的极小范围内迅速增大，且在收缩处达到最大值。在靠近收缩区下游固壁面形成一个带状的强拉伸区域。

在聚合物应力场研究中，目前大多数经典唯象学本构方程只能反映流体第一法向应力差，而无法表征流体第二法向应力差。近年来人们对流体流动的研究表明，流体的第二法向应力差并不恒等于零。而 XPP 模型通过引入参数 α ，克服了经典唯象学本构方程的不足之处，揭示了第二法向应力差不为零的特征（当 $\alpha = 0$ 时，第二法向应力差为零）。图 2 (c)、(d) 是由 XPP 模型表征平板收缩流体的第一、二法向应力差等值线图。由图可以看出，在远离收缩处，第一、二法向应力差接近零。这表明此处流场变化趋势比较平缓，流场对分子链的作用很小，分子链处于近平衡状态。收缩处附

近区域，第一、二法向应力差的变化较大，则表明流场受到的剪切、拉伸作用对分子链的影响较大，使分子链产生较大的拉伸。而在下游流道，第一、二法向应力差变得越来越小，说明下游区域流场变化趋于平缓，流体受到的剪切、拉伸作用逐渐减弱且对分子链的影响也越来越小，分子链得到松弛逐渐向平衡态恢复。

2.2 嵌件中心放置时收缩流的分析

在聚合物成型过程中，流道中常包含一些矩形的嵌件，本文为了研究矩形嵌件流道内的流动，在收缩区上游放置边长为 $3H_2$ 的正方形嵌件，其中心距收缩处为 $5.5H_2$ 。其他参数的选取与上述模拟一样，且计算中嵌件 4 个表面边界设定为固壁边界。图 3 是嵌件中心位于 $(-5.5H_2, 0H_2)$ 时，收缩流流函数、拉伸量 λ 、第一法向应力差、第二法向应力差的等值线图。虽然此时流道中放置了嵌件，但由于嵌件中心刚好位于中轴线上，因此整个流道仍具有对称结构，理论上这种对称流道内表征聚合物宏观信息量应该沿收缩流中轴线对称。实际由图 3 也可看出，进行全域模拟得到的表征聚合物宏观信息量确实关于收缩流中轴线对称。

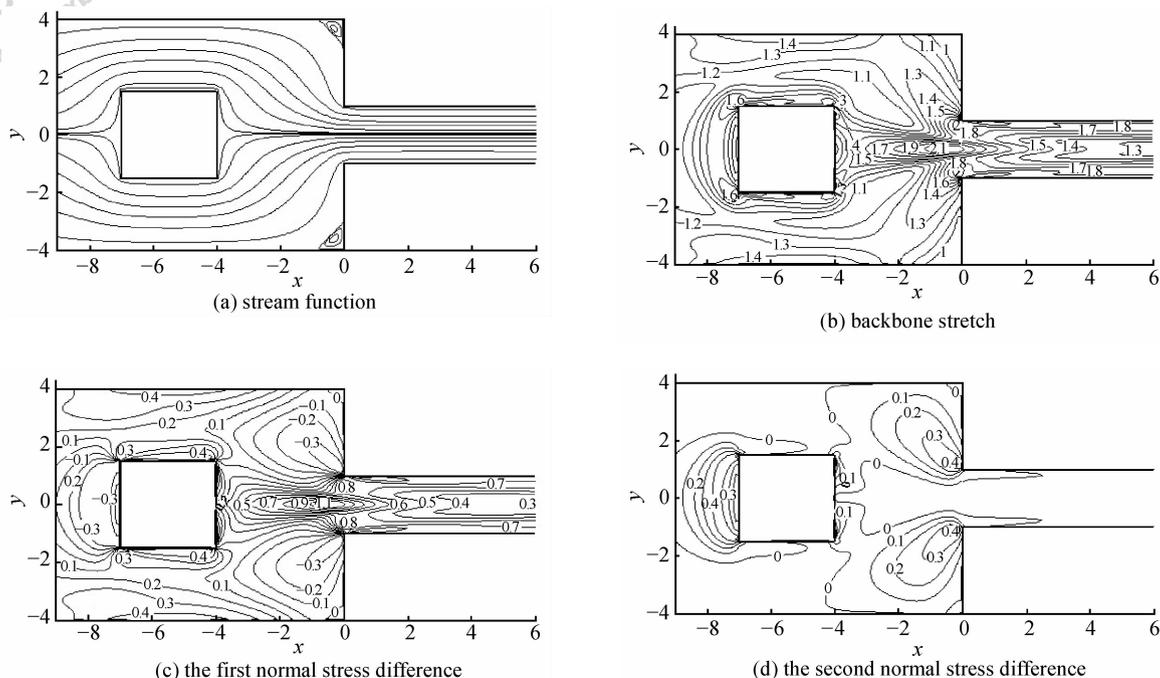


图3 中心放置嵌件对收缩流表征量的影响

Fig. 3 Influence of inset lying center line on viscoelasticity quantity

就流函数等值线在上游拐角处形成的涡而言,由图3(a)可以看出,虽然在上游拐角处形成对称的涡,但涡的整体尺寸比图2(a)的小。就流函数等值线的分布而言,在中轴线上,流函数等值线接近嵌件时沿中轴线发生分离,并紧贴嵌件上、下表面绕过嵌件而后汇合再进入收缩区;在嵌件上、下表面区域,流函数等值线近似平行于 x 轴;在嵌件后侧区域,流函数等值线向中轴线急剧偏转。在收缩区下游,流函数等值线平行于 x 轴。这一流函数等值线的变化规律与聚合物成型过程中嵌件流道的实际流动相吻合。

由图3(b)可以看出,由于嵌件对流场的剪切和拉伸作用,使得嵌件表面区域拉伸量增大,形成一个以嵌件为内核的强拉伸包围圈,在嵌件4个拐角处产生较大拉伸量。嵌件后侧形成锥形强拉伸区域,这一区域一直延续到收缩区下游。锥形强拉伸区域与原来楔形强拉伸区域之间夹着拉伸量很小的弱拉伸区域。形成如此复杂的拉伸区域主要原因是:嵌件对流场的作用引起锥形强拉伸区域,而楔形强拉伸区域是由收缩处对流场作用引起的。虽然嵌件和收缩处对拉伸量的影响区域有一定重叠,但在不同区域内嵌件和收缩处对拉伸量影响程度不

同,在二者影响都比较小的区域形成弱拉伸区域。上游强拉伸区域拉伸量在进入下游后,在靠近下游固壁面形成一个带状的强拉伸区域。

图3(c)是嵌件中心放置时收缩流第一法向应力差的等值线图。由图可以看出,嵌件附近区域的第一法向应力差较大,且越靠近嵌件表面该值越大,这是因为嵌件对流场有强烈的剪切、拉伸作用,而这些作用表现在分子链上即为分子链拉伸变长,这样导致该区域的聚合物弹性变大。在嵌件后侧,第一法向应力差形成一个与拉伸量相似的锥形等值线图,且取值较大,这是由于在嵌件后侧,流场的回流过程将形成一个强剪切区域,作用在分子链上就表现为分子链拉伸量增大,即聚合物弹性变强;同时可以看到,第一法向应力差最大值也出现在这一锥形区域,这表明在嵌件位置与收缩口的位置相距比较近时,流场经过嵌件后侧的回流后又受到了收缩拐角的剪切、拉伸作用,导致在嵌件后侧的分子链还没来得及松弛,又受到拉伸,使得聚合物弹性继续增加;在收缩区域下游,第一法向应力差逐渐变小则反映出随着流场剪切、拉伸作用的逐渐减弱,分子链逐渐松弛,拉伸长度变短接近平衡态长度。由图3(d)可以看出,在上游拐角处,

第二法向应力差与没有嵌件时的变化趋势相似,在嵌件前表面形成半球状第二法向应力差区域;在嵌件后表面,第二法向应力差等值线沿中轴线分离,并分别向收缩区上游拐角发展。在收缩处下游区域,第二法向应力差接近零。

综上所述,由于嵌件中心放置在流道内,使得整个流道仍具有对称结构,表征聚合物宏观信息的量仍关于收缩流中轴线对称,但此时聚合物宏观表征量与没有嵌件时的变化趋势明显不同。就流函数等值线而言,中心放置嵌件时,在收缩区上游拐角处形成对称的涡,但涡的整体尺寸比不带嵌件时小;由于嵌件的作用,使得拉伸量在嵌件后侧形成一个锥形强拉伸区域;第一、二法向应力差在嵌件附近变化很大。因此可见,嵌件对流场的影响很大。

2.3 嵌件单侧放置时收缩流的分析

当流道中嵌件处于非对称位置时,流道的对称性被破坏,此时采用对称边界模拟半场收缩流已经不适用,必须采用全域模拟。图 4 是采用同位网格有限体积方法对嵌件单侧放置收缩流全域模拟的流函数、拉伸量 λ 、第一法向应力差、第二法向应力差等值线对比图,其中嵌件中心坐标分别为 $(-5.5H_2, 1.5H_2)$ 和 $(-5.5H_2, 2.0H_2)$,其他计算参数以及边界设定与嵌件中心放置时相同。

由图 4 (a)、(b)可以看出,当嵌件中心位于不同位置时,与图 3 (a)相比,不仅收缩区上游上半区域($y > 0$)拐角处涡的整体尺寸在增大,而且涡的形状也发生了变化;收缩区上游下半区域($y < 0$)拐角处涡的变化不明显。就流函数等值线分布而言,在接近嵌件时发生分离,其分离位置随嵌件中心位置向上固壁移动而向上移动,并紧贴嵌件的上、下表面绕过嵌件而后汇合。在嵌件后表面区域,流函数等值线汇合位置与嵌件中心位置基本等高。在收缩区下游流函数等值线平行 x 轴。

图 4 (c)、(d)是嵌件中心位于不同位置时收缩流拉伸量 λ 等值线图。拉伸量在收缩区上游拐角附近非拉伸区域变化趋势和此处涡变化趋势相似,并且其形状也和涡的形状相似。嵌件上表面区域拉伸量随嵌件中心位置向上固壁移动而变小。在嵌件后侧,锥形强拉伸区域与原来楔形强拉伸区域合并成一个强拉伸区域,而夹在其中的弱拉伸区域随嵌件中心位置向上固壁移动变小,甚至消失。由于此

时嵌件完全处在收缩流上半区域,它对收缩流下半区域拉伸量的影响相对小一些,所以在收缩流下半区域仍可发现夹在强拉伸区域中的弱拉伸区域,并且此区域随嵌件中心位置向上固壁移动变大。在收缩区下游,固壁附近形成一个带状强拉伸区域,且靠近上固壁拉伸量比靠近下固壁拉伸量大。

图 4 (e)、(f)是嵌件中心位于不同位置时收缩流第一法向应力差等值线对比图。由图可以看出,随着嵌件中心位置向上固壁移动,嵌件上表面和上固壁间的第一法向应力差减少。这表明随着嵌件上表面和固壁间流体流动的速度减小,流体受到的剪切、拉伸作用减小且对分子链的作用也在减少。在嵌件后侧,锥形第一法向应力差等值线区域与拐角处等值线区域合并成一个区域,该区域第一法向应力差较大,且其最大值随嵌件中心位置向上固壁移动而变小。这是由于嵌件和拐角对流场的共同作用使得这一区域流体受到剧烈的剪切、拉伸作用,同时该区域的分子链不仅随流场运动,而且还存在一些旋转和碰撞运动,导致分子链受到的拉伸作用较大。在收缩区下游,越靠近固壁边界,第一法向应力差越大。图 4 (g)、(h)是嵌件中心位于不同位置时收缩流第二法向应力差等值线对比图,由图可以看出,由于嵌件对流场的剪切和拉伸作用,在嵌件后表面,第二法向应力差等值线发生分离,并分别向收缩区拐角发展。在收缩处下游区域,第二法向应力差接近零。此时第二法向应力差最大值出现在收缩处。

综合图 4 可以看出,嵌件单侧放置时收缩流中表征聚合物宏观信息的量不具有对称性。相对没有嵌件的收缩流而言,当嵌件中心放置时,收缩区上游的涡只是大小发生变化,形状并没有变化;但当嵌件单侧放置时,不仅涡的整体尺寸变化明显,而且涡的形状也发生质的变化;在图 4 中,由于嵌件位置完全处于流场上半区域,所以导致拉伸量在嵌件后侧形成的锥形强拉伸区域与上半区域收缩处的强拉伸区域合并,而下半区域的强拉伸区域有扩大的趋势;第一法向应力差与拉伸量出现类似的情况,第二法向应力差在嵌件后侧发生分离,并向收缩处发展。总之,当在收缩流道中放置嵌件或当嵌件处于流道的不同位置时,表征聚合物宏观信息的量均发生明显的变化,可见,嵌件对宏观行为的影响不可忽略。在聚合物成型过程中,应该充分考虑嵌件的影响。

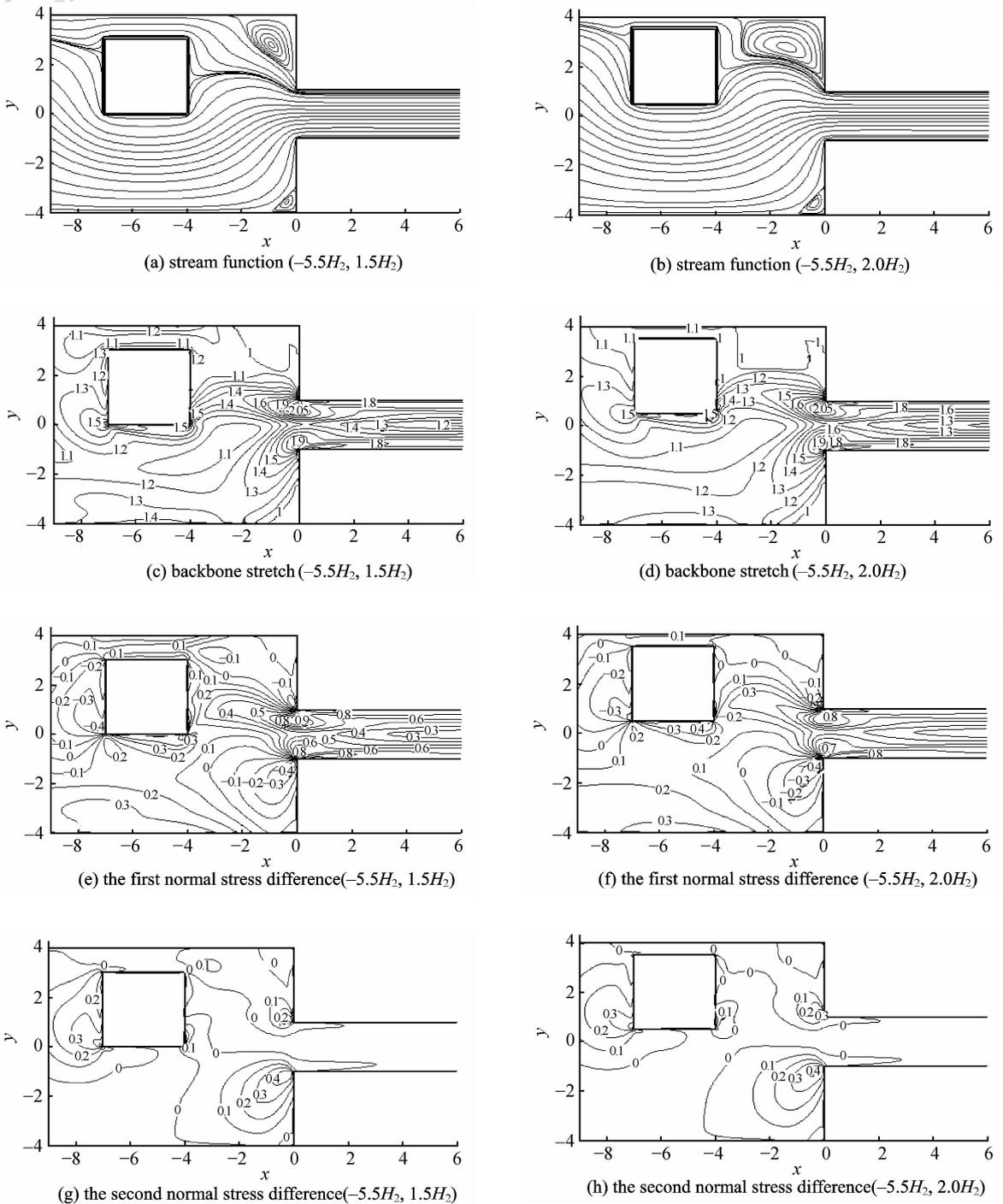


图 4 单侧放置嵌件时对收缩流表征量的影响

Fig. 4 Influence of inset lying side of planar contraction on viscoelasticity quantity

3 结 论

本文选取基于 Doi-Edwards 模型发展起来的 XPP 模型作为本构关系，结合控制方程数值求解的稳定化技术，采用同位网格有限体积法首先对

4 : 1 平板收缩流进行了全域模拟，而后对聚合物成型中常见的嵌件收缩流进行了模拟，得出结论如下。

(1) 应用同位网格有限体积法模拟复杂几何型腔流体流动，不仅计算结果可靠，而且实施简单，

能够合理地处理速度、压力以及速度、应力的耦合。

(2) 在聚合物浓厚体系中, 无论是带嵌件的收缩流, 还是不带嵌件的收缩流, 都会在收缩区上游拐角形成涡; 但随着嵌件中心位置的变化, 涡的大小和形状均将发生明显的变化。

(3) 在聚合物浓厚体系的收缩流中, 当没有嵌件时, 拉伸量可以分成两个楔形的弱拉伸区域和一个楔形的强拉伸区域; 当嵌件中心位于中轴线上时, 在嵌件后侧, 拉伸量形成锥形强拉伸区域, 夹在锥形强拉伸区域与原来楔形强拉伸区域之间还有弱拉伸区域。随着嵌件中心位置向上固壁移动, 锥形强拉伸区域与原来收缩流上半区域的楔形强拉伸区域合并, 而收缩流下方的楔形强拉伸区域形状将发生变化。

(4) 在嵌件收缩流中, 第一、二法向应力差在嵌件附近发生明显的变化, 而在嵌件后侧, 第一法向应力差形成锥形等值线区, 第二法向应力差等值线则发生分离。

符 号 说 明

Re ——Reynolds 数

p ——静压力, Pa

q ——链末端连接臂的个数

u —— x 方向上的速度, $m \cdot s^{-1}$

v —— y 方向上的速度, $m \cdot s^{-1}$

We ——Weissenberg 数

λ ——拉伸量, $N \cdot m^{-2}$

$\tau_{xx}, \tau_{xy}, \tau_{yy}, \tau_{zz}$ ——偏应力分量, $N \cdot m^{-2}$

References

- [1] Wu Qiye (吴其晔), Wu Jing'an (巫静安). Polymer Rheology (高分子材料流变学). Beijing: Higher Education Press, 2002
- [2] Zhou Chixing (周持兴), Yu Wei (俞炜). Polymer Processing Theory (聚合物加工理论). Beijing: Science Press, 2004
- [3] Liu Hesheng (柳和生), Tu Zhigang (涂志刚), Xiong Honghui (熊洪槐). Viscoelastic constitutive equations of polymer melt. *Polymer Materials Science and Engineering* (高分子材料科学与工程), 2002, **18** (1): 22-25
- [4] Xu Baiping (徐百平), Qu Jinping (瞿金平), He Hezhi (何和智). The research advances in polymer reptation model. *Polymer Materials Science and Engineering* (高分子材料科学与工程), 2002, **18** (1): 1-5
- [5] Verbeeten W M H, Peters G W M, Baaijens F T P. Differential constitutive equations for polymer melts: the extended pom-pom model. *Journal of Rheology*, 2001, **45** (4): 823-843
- [6] Mcleish T C B, Larson R G. Molecular constitutive equations for a class of branched polymers: the pom-pom polymer. *Journal of Rheology*, 1998, **42** (1): 81-110
- [7] Xue S C, Phan-Thien N, Tanner R I. Three dimensional numerical simulations of viscoelastic flows through planar contractions. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1998, **74** (1/2/3): 195-245
- [8] Oliveira P J, Miranda A I P. A numerical study of steady and unsteady viscoelastic flow past bounded cylinders. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2005, **127** (1): 51-66
- [9] Song Daoyun (宋道云). The algorithm of collocated-grid finite volume method and its application of numerical simulation in a contraction flow for viscoelastic fluids [D]. Shanghai: East China University of Science and Technology, 2002
- [10] Aboubacar M, Aguayo J P, Phillips P M, Phillips T N, Tamaddon-Jahromi H R, Snigerev B A, Webster M F. Modelling pom-pom type models with high-order finite volume schemes. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2005, **126** (2/3): 207-220
- [11] Aguayo J P, Phillips P M, Phillips T N, Tamaddon-Jahromi H R, Snigerev B A, Webster M F. The numerical prediction of planar viscoelastic contraction flows using the pom-pom model and higher-order finite volume schemes. *Journal of Computational Physics*, 2007, **220** (2): 586-611
- [12] Tao Wenquan (陶文铨). Numerical Heat Transfer (数值传热学). 2nd ed. Xi'an: Xi'an Jiaotong University Press, 2001
- [13] Verbeeten W M H, Peters G W M, Baaijens F P T. Numerical simulations of the planar contraction flow for a polyethylene melt using the XPP model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 2004, **117** (2/3): 73-84
- [14] Bishkoa G B, Harlenb O G, McLeisha T C B, Nicholsona T M. Numerical simulation of the transient flow of branched polymer melts through a planar contraction using the pom-pom model. *Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics*, 1999, **82** (2/3): 255