非线性粘弹性

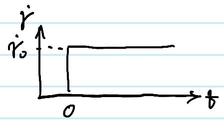
Friday, December 18, 2020 2:45 PM

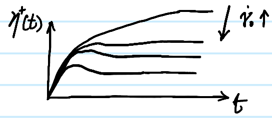
△ 实际聚合物流体的非线性性流变行为：

1) 简单剪切下法向应力差不为零，通常 $N_1 \overset{def}{=} \tau_{11}-\tau_{22}>0$，$N_2 \overset{def}{=} \tau_{22}-\tau_{33}<0$

$\Psi_1 \overset{def}{=} -\frac{\tau_{11}-\tau_{22}}{\dot\gamma^2}$，$\Psi_2 \overset{def}{=} -\frac{\tau_{22}-\tau_{33}}{\dot\gamma^2}$，Pa·s 分别称第一与第二法向应力差系数

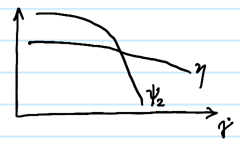
2) 简单剪切下启动响应有过冲峰。





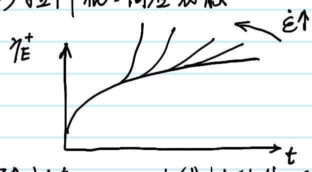
线性粘弹性只预测单调响应。

3) 简单剪切，稳态粘度和法向应力差系数呈剪切变稀



线性粘弹性只预测常数值。

4) 拉伸流响应发散



线性粘弹性只预测下包络线（$\dot\varepsilon \to 0$）

实验方法	非线性的体现	线性粘弹性的预测	准线性粘弹性
应力松弛	$G=G(\gamma_0,t)$	$G=G(t)$	$G=G(t)$
稳态剪切	$\eta=\eta(\dot\gamma)$ $\Psi_1\neq0$ $\Psi_2\neq0$	$\eta=const$ $\Psi_1=0$ $\Psi_2=0$	$\eta=const$ $\Psi_1=const>0$ $\Psi_2=0$
振荡剪切	$\tau_{12}=\sum_{n:odd}\tau_n\sin(n\omega t+\delta_n)$ 非正弦响应。 $\tau_{11}-\tau_{22}=N_{1,0}+\sum_{n:even}N_{1,n}\sin(2n\omega t+\delta_{1,n})$ $\tau_{22}-\tau_{33}=N_{2,0}+\sum N_{2,n}\sin(2n\omega t+\delta_{2,n})$	$\tau_{12}=\tau_0\sin(\omega t+\delta)$ $\tau_{11}-\tau_{22}=0$ $\tau_{22}-\tau_{33}=0$	$\tau_{12}=\tau_0\sin(\omega t+\delta)$ $\tau_{11}-\tau_{22}=N_{1,0}+N_{1,2}\sin(2\omega t+\delta_{1,2})$ $\tau_{22}-\tau_{33}=0$
启动拉伸	拉伸稠化	无拉伸稠化	拉伸稠化

△ 随体Maxwell模型与准线性粘弹性。

Maxwell模型的微分形式含有对应力张量的时间偏导数。将其改为上随体微分

$$\lambda\overset{\triangledown}{\underline{\underline{\tau}}}+\underline{\underline{\tau}}=2\eta\underline{\underline{D}}$$ 上随体Maxwell（upper-convected Maxwell，UCM）

你

Maxwell模型的积分形式含有无穷小应变近似。取消该近似：

$$\underline{\underline{\tau}}=\int_{-\infty}^{t}\frac{\eta}{\lambda^2}e^{-\frac{t-t'}{\lambda}}\underline{\underline{B}}(t,t')dt'$$ Lodge's model

上述两模型是等价的。见 R. Larson (1988) Constitutive Equations for Polymer Melts and Solutions, §1.6

下随体Maxwell（Lower-convected Maxwell，LCM）

$$\lambda\overset{\vartriangle}{\underline{\underline{\tau}}}+\underline{\underline{\tau}}=2\eta\underline{\underline{D}} \Leftrightarrow \underline{\underline{\tau}}=\int_{-\infty}^{t}\frac{\eta}{\lambda^2}e^{-\frac{t-t'}{\lambda}}\underline{\underline{C}}(t,t')dt'$$

△ 非线性微分方程形式。

$$\lambda \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} + \underline{\underline{\tau}} = 2\eta \underline{\underline{D}} \Leftrightarrow \underline{\underline{\tau}} = \int_{-\infty}^{t} \frac{\eta}{\lambda^2} e^{-(t-t')/\lambda} \underline{\underline{\gamma}}(t,t')\,dt'$$

△ 非线性微分方程形式.

例：让 η 依赖 $\underline{\underline{D}}$ 的不变量

$$I_{\underline{\underline{D}}} = \mathrm{tr}(\underline{\underline{D}}), \quad II_{\underline{\underline{D}}} = \frac{1}{2}\left[I_{\underline{\underline{D}}}^2 - (\mathrm{tr}\,\underline{\underline{D}})^2\right], \quad III_{\underline{\underline{D}}} = \det \underline{\underline{D}}$$

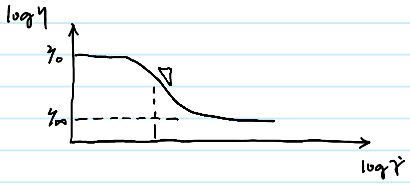
对于不可压缩流，$I_{\underline{\underline{D}}}=0$（$I_{\underline{\underline{D}}}=\underline{\underline{\dot\gamma}}$）. 对简单剪切 $III_{\underline{\underline{D}}}=0$，故常选用 $II_{\underline{\underline{D}}}$。对简单剪切 $II_{\underline{\underline{D}}}=\dot\gamma$

故常以简单剪切下的 $\dot\gamma$ 依赖性作为材料本构的规定性。

e.g. Carreau-Yasuda 模型：

$$\frac{\eta-\eta_\infty}{\eta_0-\eta} = \left[1+(\lambda\dot\gamma)^a\right]^{(n-1)/a}$$

Carreau (1968) PhD Thesis $a=2$
Yasuda (1979) PhD Thesis, 任意 a
Yasuda et al. (1981) Rheol. Acta 20:163



e.g. 幂率模型 $\eta = \begin{cases} \eta_0 & \dot\gamma \le \dot\gamma_0 \\ \eta_0 (\dot\gamma/\dot\gamma_0)^{n-1} & \dot\gamma \ge \dot\gamma_0 \end{cases}$

e.g. 宾汉模型

$$\eta = \begin{cases} \infty & , \tau \le \tau_0 \\ \mu_0 + \tau_0/\dot\gamma & , \tau \ge \tau_0 \end{cases}, \text{ 其中 } \tau = II_{\underline{\underline{\tau}}}$$

Oldroyd (1947) Proc. Camb. Phil. Soc. 43:100, 43:383, 43:396, 43:521, 44:200, 44:214, 45:596, 47:410

代入微分方程：

$$\underline{\underline{\tau}} + \eta(\dot\gamma)\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}/G = \eta(\dot\gamma)\, 2\underline{\underline{D}} \quad 或 \quad \underline{\underline{\tau}} + \eta(\dot\gamma)\overset{\triangle}{\underline{\underline{\tau}}}/G = \eta(\dot\gamma)\, 2\underline{\underline{D}}$$

问题，非线性行为在无穷小应变极限不收敛为线性。

例：引入 $\underline{\underline{\dot\gamma}}$ 的二次项。

$\overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}$ 或 $\overset{\triangle}{\underline{\underline{\tau}}}$，以及 $\underline{\underline{D}}$ 都只与 $\underline{\underline{\dot\gamma}}$ 有关，故构建

$$\underline{\underline{\tau}} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} + \underbrace{\frac{1}{2}\lambda_3 (2\underline{\underline{\tau}}\,\underline{\underline{D}} + 2\underline{\underline{D}}\,\underline{\underline{\tau}}) + \frac{1}{2}\lambda_5 (\mathrm{tr}\,\underline{\underline{\tau}})\, 2\underline{\underline{D}} + \frac{1}{2}\lambda_6 (\underline{\underline{\tau}} : 2\underline{\underline{D}})\underline{\underline{I}}}_{\text{含 } \underline{\underline{\tau}} \text{ 与 } \underline{\underline{D}} \text{ 的各类积}}$$

$$= \eta\; 2\underline{\underline{D}} + \underbrace{2\lambda_2 \overset{\nabla}{\underline{\underline{D}}} + \lambda_4 \underline{\underline{D}} + \frac{1}{2}\lambda_7 (\underline{\underline{D}} : \underline{\underline{D}})\underline{\underline{I}}}_{\text{含 } \underline{\underline{D}} \text{ 的随体导数和二次项}}$$

Oldroyd 8-constant model
Oldroyd (1958) Proc. R. Soc. A 245:278
Oldroyd (1961) Rheol. Acta 1:337

上式代表了一家族的模型，令一些参数为零可得到多个版本，分别命名为其他模型。

例：$\underline{\underline{\tau}} + \lambda_1 \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}} = 2\eta(\underline{\underline{D}} + \lambda_2 \overset{\nabla}{\underline{\underline{D}}})$，Oldroyd-B model

你你

例：引入应力张量的二次项

e.g. Giesekus model　Giesekus (1982) J. Non-Newt. Fluid Mech. 11:69, Rheol. Acta 21:366
(1983) ibid. 12:367

$$\underline{\underline{\tau}} = \underline{\underline{\tau}}_s + \underline{\underline{\tau}}_p, \quad \underline{\underline{\tau}}_s = \eta_s\, 2\underline{\underline{D}}, \quad \underline{\underline{\tau}}_p + \lambda_1 \overset{\nabla}{\underline{\underline{\tau}}}_p - \alpha\lambda_1/\eta_p\, \underline{\underline{\tau}}_p^2 = 2\eta_p \underline{\underline{D}}$$

α："mobility factor"，描述高分子链拖曳力的各向异性

△ 微分型模型的不足：等价积分式都是单模 Maxwell 记忆核函数。办法：1) 写成等价积分式后再改记忆函数（不总是方便）；2) 把应力张量写成 $\underline{\underline{\tau}} = \sum_i \underline{\underline{\tau}}_i$

△ 积分方程模型：由 Lodge 模型

$$\underline{\underline{\tau}} = \int_{-\infty}^{t} M(t-t')\underline{\underline{B}}(t-t')\,dt'$$

出发，可以作如下非线性修改：1）令记忆函数依赖运动学度量，2）引入$\underline{\underline{B}}$的非线性项。3）多重记忆，多积积分

例：K-BKZ型　Kaye (1962) Bernstein (1963) Trans. Soc. Rheol. 7:391

$$\underline{\underline{\tau}} = \int_{-\infty}^{t} \left[\frac{\partial V(t-t', I_{\underline{\underline{B}}}, II_{\underline{\underline{B}}})}{\partial I_{\underline{\underline{B}}}} \underline{\underline{B}}(t,t') + \frac{\partial V(t-t', I_{\underline{\underline{B}}}, II_{\underline{\underline{B}}})}{\partial II_{\underline{\underline{B}}}} \underline{\underline{B}}^{-1}(t,t') \right] dt'$$

其中

$V(t-t', I_{\underline{\underline{B}}}, II_{\underline{\underline{B}}})$ 称 time-dependent energy kernel

其时间积分：$W = \int_{-\infty}^{t} V\,dt'$，$W = W(I_{\underline{\underline{B}}}, II_{\underline{\underline{B}}})$ 称 strain energy function

如果 V的偏导数可因式分解成下式

$$\underline{\underline{\tau}} = \int_{-\infty}^{t} M(t-t') \left(\frac{\partial W(I_{\underline{\underline{B}}}, II_{\underline{\underline{B}}})}{\partial I_{\underline{\underline{B}}}} \underline{\underline{B}}(t,t') + \frac{\partial W(I_{\underline{\underline{B}}}, II_{\underline{\underline{B}}})}{\partial II_{\underline{\underline{B}}}} \underline{\underline{B}}^{-1}(t,t') \right) dt'$$

但该因式分解是一个不适定（ill-posed）问题，即不对应唯一结果。

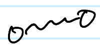
橡胶弹性模型中常假 $M(t) = \text{const}$，即纯弹性。

neo-Hookian：$W = C_1(I_{\underline{\underline{B}}} - 3)$；Mooney-Rivlin，$W = C_1(I_{\underline{\underline{B}}} - 3) + C_2(II_{\underline{\underline{B}}} - 3)$

广义Rivlin：$W = \sum_{p,q=0}^{N} C_{pq} (I_{\underline{\underline{B}}} - 3)^p (II_{\underline{\underline{B}}} - 3)^q$

△ 本构方程与分子理论的关系：

Elastic dumbell ⇔ UCM，含溶剂的版本 ⇔ Oldroyd-B



Rouse-Zimm：$M(t) = -2\eta_s \delta'(t) + \sum_{j=1}^{N} \frac{\eta_j}{\lambda_j^2} e^{-t/\lambda_j}$，$W = I_{\underline{\underline{B}}}$

Lodge-network：$M(t) = \sum_{j=1}^{N} \eta_j/\lambda_j^2 \, e^{-t/\lambda_j}$，$W = I_{\underline{\underline{B}}}$

Tanner-Simmons network rupture：

$$M(t) = \sum_{j=1}^{N} \eta_j/\lambda_j^2 \, e^{-t/\lambda_j}, \quad W(I_{\underline{\underline{B}}}, II_{\underline{\underline{B}}}) = \begin{cases} I_{\underline{\underline{B}}}, & I_{\underline{\underline{B}}} \le I_0 \\ I_0, & I_{\underline{\underline{B}}} > I_0 \end{cases}$$

Curtiss-Bird / Doi-Edwards：

$$M(t) = \frac{96\eta_0}{\lambda^2} \sum_{i:\text{odd}} e^{-\pi^2 i^2 t/\lambda}, \quad W(I_{\underline{\underline{B}}}, II_{\underline{\underline{B}}}) = \frac{5}{4\pi} \int \underbrace{\ln \underline{\underline{B}} : (\vec{u}\otimes\vec{u})}_{\text{是个标量必须表示成 } I_{\underline{\underline{B}}},\, II_{\underline{\underline{B}}} \text{ 的表达式。}} d\vec{u}$$