

项目公示信息

项目名称：高聚物加工过程的数学模型及数值方法研究

完成单位：西北工业大学、西安工程大学

完成人：王晓东、欧阳洁、苏进、周文、高普阳

项目简介：

本项目是应用基础研究，属数学、力学、高分子科学和高聚物加工技术等交叉学科领域。

高聚物材料的研究深度和应用广度已成为衡量一个国家科技水平的重要标志。高聚物制品的性能不仅取决于材料本身的性质，而且还取决于加工中形成的取向结构和相形态分布等，这使得最终的制品性能很难预见。为了实现性能预测，使制品具有精准的几何尺寸(宏观尺度上的成形问题)和优良的性能指标(介观尺度上的成性问题)，就必须对高聚物的加工过程进行理论研究，揭示其成形和成性机理。

本项目在国家自然科学基金重大项目“高聚物成型加工与模具设计中关键力学和工程问题(2005-2009)”、国家自然科学基金面上项目“模拟复杂流体自由界面不规则形态演化的多尺度模型及计算方法研究(2009-2012)”和国家重点基础研究发展计划“高聚物成型模拟及模具设计制造中的关键问题研究(2012-2016)”等的支持下，率先在国内开展了高聚物加工过程的系统化数学建模和数值模拟研究，建立了一套高聚物成型加工过程的模拟分析工具，特别是在取向结构、结晶、粘弹自由面流动、高 Weissenberg 数问题等方面取得了创新和突破，实现对典型加工过程的数值模拟及制品性能预测。主要发现点有：

1) 推导了非等温条件下高聚物大分子取向的数学方程，提出了静态条件下高聚物熔体冷却过程的晶体形态演化模型，实现了高聚物熔体的宏观粘弹流动与介观取向结构和晶体形态演化双向耦合的多尺度数学建模。

2) 提出了加工中高聚物熔体自由面位置准确捕捉的两种多相流数学模型/方法，这些模型/方法各具特色，在不同的应用场合凸显了各自的优势。

3) 解决了由速度-压力失耦、对流占优和粘弹流动高 Weissenberg 数三方面

因素导致的高聚物粘弹流动模拟的数值不稳定问题,分别针对这三种因素提出了相应的稳定、高效数值求解方法。

4) 解决了加工过程模拟涉及的几何建模、复杂型腔和优化等问题,实现了注射成型、气/水辅成型、共注射成型等典型加工过程的数值模拟及一些常见制品的性能预测。

本项目的科学价值在于: 1) 首次将等温条件下的分子取向模型推广到非等温情形,率先提出了自相容的高聚物晶体形态演化模型,揭示了高聚物结晶的一些内在机理,给出了取向基础上流动诱导成核的数学描述,解决了宏观粘弹流动与介观取向结构和相形态演化的多尺度耦合建模问题; 2) 建立了粘弹流动自由面不规则形态演化的模型/方法,解决了 Euler 框架下的粘弹气-液两相一体化建模问题、Lagrange 框架下的固壁条件处理和压力不稳定问题、Euler-Lagrange 框架下的网格移动问题; 3) 率先将变分多尺度等技术用于解决不可压缩粘弹流动的速度-压力失耦和对流占优引起的数值不稳定问题,分别用有限体积和格子 Boltzmann 方法将粘弹流动模拟的 Weissenberg 数限制提高到世界领先水平; 4) 首次实现了一些典型加工过程的数值模拟,使得通过数学手段揭示高聚物的成形和成性机理、预测高聚物制品的性能成为现实。

本项目在 Journal of Computational Physics, Journal of Chemical Physics, Physical Review E, Computer Physics Communications, International Journal of Heat and Mass Transfer, Polymers, Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics、Computational Mechanics 和物理学报等国内外著名刊物上共发表论文 110 篇,其中 SCI 收录 98 篇,培养了陕西省优秀博士学位论文 6 篇。本项目所发表的论文被 38 个国家和地区 205 所科研机构的 510 余位学者在论文中正面引用,15 篇代表作 SCI 被引 227 次。

主要知识产权目录(15 篇代表作及专利、计算机软件著作权等)：

主要论文专著目录（限 15 条）

序号	论文专著名称	刊名	作者	年卷页码（xx 年 xx 卷 xx 页）	发表 时间	通讯 作者	第一 作者
1	A coupled continuous and discontinuous finite element method for the incompressible flows	International Journal for Numerical Methods in Fluids	高普阳, 欧阳洁, 戴鹏飞, 周文	2017 年 84 卷 477-493 页	2017.7	欧阳洁	高普阳
2	Numerical simulation of viscoelastic fluid flows using a robust FVM framework on triangular grid	Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics	周文, 欧阳洁, 王晓东, 苏进, 杨斌鑫	2016 年 236 卷 18-34 页	2016.10	欧阳洁	周文
3	Numerical simulation of the polymer crystallization during cooling stage by using level set method	Computational Materials Science	刘治军, 欧阳洁, 周文, 王晓东	2015 年 97 卷 245-253 页	2015.1	欧阳洁	刘治军
4	Investigating the role of oriented nucleus in polymer shish-kebab crystal growth via phase-field method	Journal of Chemical Physics	王晓东, 欧阳洁, 苏进, 周文	2014 年 140 卷 114102 号	2014.3	欧阳洁	王晓东
5	Lattice Boltzmann method coupled with the	Physical Review E	苏进, 欧阳洁, 王晓东, 杨斌鑫	2013 年 88 卷 053304 号	2013.11	欧阳洁	苏进

	Oldroyd-B constitutive model for a viscoelastic fluid						
6	Lattice Boltzmann method for the simulation of viscoelastic fluid flows over a large range of Weissenberg numbers	Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics	苏进, 欧阳洁, 王晓东, 杨斌鑫, 周文	2013 年 194 卷 42-59 页	2013.4	欧阳洁	苏进
7	Simulation of complex filling process based on the generalized Newtonian fluid model using a corrected SPH scheme	Computational Mechanics	任金莲, 欧阳洁, 蒋涛, 李强	2012 年 49 卷 643-665 页	2012.5	欧阳洁	任金莲
8	Multi-scale modeling and simulation of crystallization during cooling in short fiber reinforced composites	International Journal of Heat and Mass Transfer	阮春蕾, 欧阳洁, 刘帅强	2012 年 55 卷 1911-1921	2012.3	欧阳洁	阮春蕾
9	A mixed corrected symmetric SPH (MC-SSPH) method for computational dynamic problems	Computer Physics Communications	蒋涛, 欧阳洁, 任金莲, 杨斌鑫, 许晓阳	2012 年 183 卷 50-62 页	2012.1	欧阳洁	蒋涛
10	Variational multiscale element free Galerkin method for the water wave	Journal of Computational Physics	张林, 欧阳洁, 蒋涛, 阮春蕾	2011 年 230 卷 5045-5060 页	2011.6	欧阳洁	张林

	problems						
11	Modelling and simulation of moving interfaces in gas-assisted injection moulding process	Applied Mathematical Modelling	李强, 欧阳洁, 杨斌鑫, 蒋涛	2011 年 35 卷 257-275 页	2011.1	欧阳洁	李强
12	Modeling and simulation of the viscoelastic fluid mold filling process by level set method	Journal of Non-Newtonian Fluid Mechanics	杨斌鑫, 欧阳洁, 李强, 赵智峰, 刘春太	2010 年 165 卷 1275-1293 页	2010.10	欧阳洁	杨斌鑫
13	Variational multiscale element-free Galerkin method for 2D Burgers' equation	Journal of Computational Physics	张林, 欧阳洁, 王晓侠, 张小华	2010 年 229 卷 7147-7161 页	2010.9	欧阳洁	张林
14	Element-free characteristic Galerkin method for Burgers' equation	Engineering Analysis with Boundary Elements	张小华, 欧阳洁, 张林	2009 年 33 卷 356-362 页	2009.3	欧阳洁	张小华
15	On a multi-scale element-free Galerkin method for the Stokes problem	Applied Mathematics and Computation	张林, 欧阳洁, 张小华, 张文彬	2008 年 203 卷 745-753 页	2008.9	欧阳洁	张林