

О некоторых аспектах математического моделирования течений полимерных жидкостей

Гуань Сюэлинь

Научный руководитель — канд. физ.-мат. наук, доц. Е. В. Мищенко

06.06.2022

План доклада

- 1 Введение
- 2 Численное нахождение объёмного заряда в нестационарных ЭГД течениях несжимаемой полимерной жидкости.
- 3 Как получить формулу для нахождения численных решений.
- 4 Результаты численных экспериментов

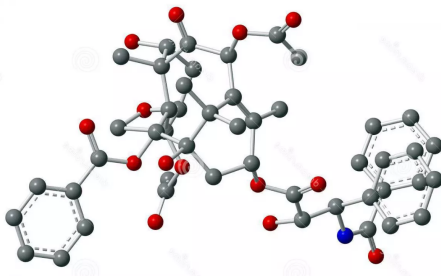


Рис 1. Полимер.

У слова «полимер» греческое происхождение: *pollá* (многие) и *méros* (часть). Полимеры — это вещества, которые состоят из множества мономеров (структурных звеньев).

Мономерные звенья — это повторяющиеся структурные фрагменты, которые включают в себя несколько атомов.

По строению полимеры бывают линейными, разветвленными или сетевыми. Количество мономерных звеньев и молекулярная масса каждого из них влияют на свойства будущего материала.

Синтетические полимеры:



Рис.: нейлон



Рис.: эпоксидная смола



Рис.: полиэтилен

Природные полимеры:



Рис.: природный каучук



Рис.: белки



Рис.: целлюлоза

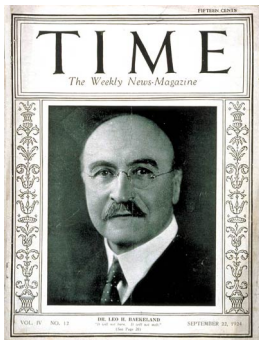


Рис 2. Лео Бакеланд на обложке журнала Time.

До XIX века промышленности хватало природных полимеров. Но со временем из-за нехватки ресурсов появилась потребность и в других материалах. В 1909 году американский химик Лео Бакеланд синтезировал материал под названием бакелит. Именно с этого открытия началась эра синтетических материалов, в химических лабораториях началась разработка новых видов полимеров.

Синтетические полимеры получают реакцией соединения мономеров. Полимеры – это бусы, где бусинами являются мономеры. При получении полимеров не меняется состав, меняется только их количество. В зависимости от количества мономеров меняются их свойства. Полимер может быть в одном из следующих четырех состояний: частично кристаллическом, стеклообразном, высокоэластическом и вязкотекучем. От силы и характера взаимодействия звеньев зависит, какое именно состояние принимается. Полимеры широко используются в медицине, строительстве, пищевой промышленности, автомобилестроении и других отраслях.

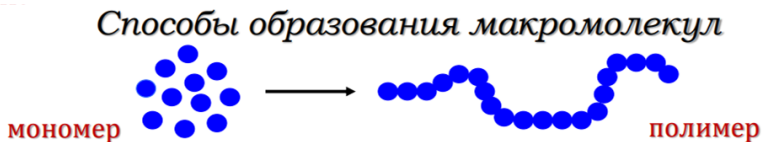


Рис 3.



Рис 4.

Широкое применение полимерных материалов в самых разных областях индустрии требует развитой математической теории полимерных сред. Математическое моделирование течений растворов и расплавов полимеров представляет достаточно сложную математическую задачу из-за молекулярной структуры таких сред, состоящих из длинных перепутанных макромолекул.

За последние пятьдесят лет было предложено большое количество различных моделей динамики полимеров, описывающих движение жидких полимеров с той или иной точностью: например, реологическая модель Покровского-Виноградова, модель рептаций, модель на основе цепей Крамерса. Модели отличаются как по подходам к их получению, так и по сложности. При этом нельзя сказать, что какая-либо конкретная модель имеет преимущества перед остальными. Различные режимы течения требуют учёта различных особенностей поведения полимерных жидкостей, что в свою очередь делает разумным применение различных моделей.



Рис 5. Владимир Николаевич
Покровский

В лаборатории вычислительных проблем задач математической физики, которую я представляю, для исследования течений полимерных жидкостей и их свойств применяется реологическая модифицированная модель Покровского-Виноградова.

Модель является мезоскопической, т. е. определяющие соотношения для неё получены из моделирования движения одной макромолекулы в анизотропной жидкости, имитирующей воздействие на эту молекулу соседних молекул полимера и растворителя.

При анализе модели было показано, что она способна отражать характерные свойства жидких полимеров и передавать связь между молекулярной структурой вещества и макроскопическими характеристиками жидкости.

Некоторые работы лаборатории по тематике:

Блохин А.М., Ткачев Д.Л. Неустойчивость по Ляпунову стационарных течений полимерной жидкости в канале с перфорированными стенками. Математический сборник. 2022, т. 213, №3

Блохин А.М., Семенко Р.Е. Об одной модели вихревого движения несжимаемой полимерной жидкости в приосевой зоне. Сибирский журнал индустриальной математики, 2016, т. XIX, No 1(65)

Блохин А.М., Рудомётова А.С. Стационарные решения уравнений, описывающих неизотермическую электроконвекцию слабопроводящей несжимаемой полимерной жидкости. Сиб. журн. индустр. мат., 2015, т.18., No 1 (61). С .3-13

Блохин А. М., Семисалов Б. В. Стационарное течение несжимаемой вязкоупругой полимерной жидкости в канале с эллиптическим сечением. Сиб. журн. индустр. мат. 2014. Т. XVII, No 4 (60). С. 38–47.

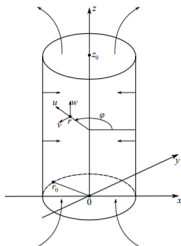


Рис.: Приосевая вихревая зона

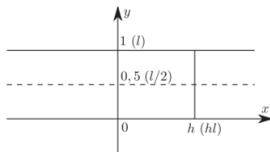


Рис.: Плоский конденсатор

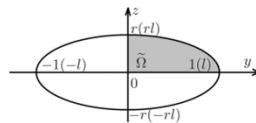


Рис.: Эллиптическое сечение

Численное нахождение объёмного заряда в нестационарных ЭГД течениях несжимаемой полимерной жидкости.

Постановка задачи.

Двумерные электродинамические (ЭГД) уравнения для описания течений полимерных сред в обезразмеренном виде имеют следующий вид

$$\operatorname{div} \vec{u} = u_x + v_y = 0, \quad (1.1)$$

$$\frac{d\vec{u}}{dt} + \nabla P = \operatorname{div} \Pi - \sigma q \vec{Q}, \quad (1.2)$$

$$\frac{da_{11}}{dt} - 2A_1 u_x - 2a_{12} u_y + \mathcal{L}_{11} = 0, \quad (1.3)$$

$$\frac{da_{12}}{dt} - A_1 v_x - A_2 u_y + \tilde{K}_I a_{12} = 0, \quad (1.4)$$

$$\frac{da_{22}}{dt} - 2A_2 v_y - 2a_{12} u_x + \mathcal{L}_{22} = 0, \quad (1.5)$$

$$\frac{dq}{dt} - \mathbf{b} \cdot \operatorname{div}(q \vec{Q}) = 0, \quad (1.6)$$

$$\Delta_{x,y} \Phi = -q. \quad (1.7)$$

В системе (1.1)–(1.7) мы полагаем (см. [11])

$$\left. \begin{aligned} u &= u(t, y), v \equiv 0, \\ a_{ij} &= a_{ij}(t, y), i, j = 1, 2; \\ P &= \mathcal{P}(t, y) - A(t)x, \\ \Phi &= \Phi(t, y), q = q(t, y). \end{aligned} \right\} \quad (1.9)$$

И получаем

$$u_t - (\alpha_{12})_y = A(t), \quad (1.10)$$

$$(\alpha_{12})_t - \alpha_2 \cdot u_y + \widetilde{K}_I \cdot \alpha_{12} = 0, \quad (1.11)$$

$$(\alpha_{11})_t - 2\alpha_{12} \cdot u_y + \widetilde{K}_I \cdot \alpha_{11} - \beta \cdot \text{Re} \cdot \Delta = 0, \quad (1.12)$$

$$(\alpha_{22})_t + \widetilde{K}_I \cdot \alpha_{22} - \beta \cdot \text{Re} \cdot \Delta = 0, \quad (1.13)$$

$$q_t - \mathbf{b} \cdot \Phi_y \cdot q_y + \mathbf{b} \cdot q^2 = 0, \quad (1.14)$$

$$\Phi_{yy} = -q. \quad (1.15)$$

К этим уравнениям надо добавить краевые условия (см. также (1.8)):

$$\left. \begin{aligned} u|_{y=0,1} &= 0, t > 0, \\ \Phi|_{y=0} &= 0, \Phi|_{y=1} = 1, t > 0, \\ q &= \mathbf{a} \cdot \Phi_y(\mathbf{a} > 0) \quad \text{при} \quad y = 1, t > 0. \end{aligned} \right\} \quad (1.16)$$

и начальные данные (см. [11])

$$\left. \begin{aligned} u|_{t=0} &= u_0(y), 0 < y < 1, \\ \alpha_{ij}|_{t=0} &= (\alpha_{ij})_0(y), 0 < y < 1, \\ \Phi|_{t=0} &= \Phi_0(y), 0 < y < 1, \\ q|_{t=0} &= q_0(y), 0 < y < 1. \end{aligned} \right\} \quad (1.17)$$

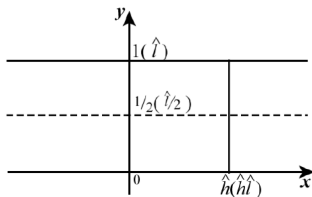


Рис 6. Плоский канал.

Будем полагать, что выполнены условия согласования начальных данных (1.16) и краевых условий (1.17) :

$$\left. \begin{aligned} u_0|_{y=0,1} &= 0, \\ \Phi_0(0) &= 0, \Phi_0(1) = 1, \\ q_0(1) &= a \cdot \alpha_0, \alpha_0 = (\Phi_0)_y(1), \end{aligned} \right\} \quad (1.18)$$

Для величин q и Φ выполнены уравнения

$$q_t - \mathbf{b} \cdot \Phi_y \cdot q_y + \mathbf{b} \cdot q^2 = 0, \quad (1.14)$$

$$\Phi_{yy} = -q, \quad (1.15)$$

краевые условия

$$\left. \begin{aligned} \Phi|_{y=0} &= 0, \Phi|_{y=1} = 1, t > 0, \\ q &= \mathbf{a} \cdot \Phi_y (a > 0) \quad \text{при} \quad y = 1, t > 0, \end{aligned} \right\} \quad (1.16')$$

и начальные данные

$$\left. \begin{aligned} \Phi|_{t=0} &= \Phi_0(y), 0 < y < 1, \\ q|_{t=0} &= q_0(y), 0 < y < 1. \end{aligned} \right\} \quad (1.17')$$

Как получить формулу для нахождения численных решений. Первый способ.

Для величин q и Φ выполнены уравнения

$$q_t - \mathbf{b} \cdot \Phi_y \cdot q_y + \mathbf{b} \cdot q^2 = 0, \quad (1.14)$$

$$\Phi_{yy} = -q, \quad (1.15)$$

Переписав уравнение (1.14) в виде

$$\left(\frac{q_t}{q^2} + \mathbf{b} \right) - \frac{\mathbf{b} \cdot \Phi_y \cdot q_y}{q^2} = 0,$$

и введя в рассмотрение функцию

$$L(t, y) = \frac{1}{q(t, y)} - \mathbf{b} \cdot t, \quad \left(q = \frac{1}{L + \mathbf{b} \cdot t} \right),$$

мы получим для L уравнение

$$L_t - \mathbf{b} \Phi_y \cdot L_y = 0. \quad (2.1)$$

Схема бегущего счёта

- Введём сеточные функции :

$$q(t, y) = q(n \cdot \tau, i \cdot h) = q_i^n,$$

$$L(t, y) = L(n \cdot \tau, i \cdot h) = L_i^n = \frac{1}{q_i^n} - \textcolor{red}{b} \cdot n \tau.$$

- В уравнении (2.1) заменим производные по t и y разностными соотношениями :

$$L_t \quad \text{на} \quad \frac{L_i^{n+1} - L_i^n}{\tau},$$

$$L_y \quad \text{на} \quad \frac{L_{i+1}^{n+1} - L_i^{n+1}}{h}.$$

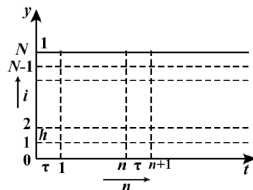


Рис 7. Итерационный процесс.

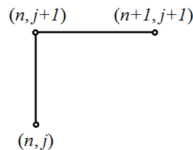


Рис 8. Шаблон для вычислений.

Разностное уравнение для оператора будет иметь вид:

$$\frac{L_i^{n+1} - L_i^n}{\tau} - \mathbf{b} \Phi_{yi}^n \frac{L_{i+1}^{n+1} - L_i^{n+1}}{h} = 0,$$

Чтобы учесть нелинейность, можно ввести дополнительный параметр $l = \overline{0, \mathcal{L} - 1}$, который характеризует число итераций по нелинейности. В итоге получим:

$$L_i^{n+1+l} = \frac{r \cdot \mathbf{b} \cdot (\Phi_y)_i^{(n+1)} \cdot L_{i+1}^{n+1+l} + L_i^n}{1 + \mathbf{b} \cdot (\Phi_y)_i^{n+1} \cdot r}, i = N - 1, \dots, 0, \quad (2.2)$$

причём

$$L_i^{n+\mathcal{L}} = L_i^{n+1},$$

$$r = \tau/h,$$

$$q_N^{n+1+l} = \mathbf{a}(\Phi_y)_N^{(n+1)} = \mathbf{a}\{1 - \frac{h^2}{2} [2 \sum_{i=1}^{N-1} i q_i^{(n+1)} + N q_N^{(n+1)}]\}. \quad (2.3)$$

Второй способ получить формулу для нахождения численных решений.

Для величин q и Φ выполнены уравнения

$$q_t - \mathbf{b} \cdot \Phi_y \cdot q_y + \mathbf{b} \cdot q^2 = 0, \quad (1.14)$$

$$\Phi_{yy} = -q, \quad (1.15)$$

Введём в рассмотрение величину $Q(t, y)$:

$$Q(t, y) = \int_0^y q(t, s) ds. \quad (3.1)$$

Обозначим $\Phi_y(t, y) = \mathcal{L}(t, y)$. В силу (1.15)

$$\mathcal{L}_y(t, y) = -q(t, y) = -Q_y(t, y), \quad (3.2)$$

Используя (3.2), из уравнения (1.14) получим

$$\mathcal{L}_{ty} - \mathbf{b}(\mathcal{L}\mathcal{L}_y)_y = 0. \quad (3.3)$$

Интегрируя (3.3) приходим к выражению

$$\mathcal{L}_t - \frac{\mathbf{b}}{2}(\mathcal{L}^2)_y = -\mathbf{b}[\mathcal{L}^2(t, 1) - \mathcal{L}^2(t, 0)]/2. \quad (3.4)$$

Переходя в (3.4) к разностным соотношениям, получаем

$$\mathcal{L}_i^{n+1} - \mathcal{L}_i^n - \textcolor{red}{b}r((\mathcal{L}_{i+1}^{n+1})^2 - (\mathcal{L}_i^{n+1})^2)/2 + \tau \textcolor{red}{b}((\mathcal{L}_N^{n+1})^2 - (\mathcal{L}_0^{(n+1)})^2)/2 = 0,$$

здесь

$$r = \tau/h, \quad \mathcal{L}_0^{(n+1)} = \frac{\mathcal{L}_0^{n+1} + \mathcal{L}_0^n}{2}.$$

Это означает, что мы имеем три типа формул для определения \mathcal{L}_i^n в зависимости от значений i .

$$\hat{\alpha}(\mathcal{L}_i^{n+1})^2 + \hat{\beta}\mathcal{L}_i^{n+1} + \hat{c} = 0, \quad (3.5)$$

Для $i = N - 2, \dots, 1$, где

$$\hat{\alpha} = \frac{\textcolor{red}{b}r}{2}, \quad \hat{\beta} = 1, \quad \hat{c} = -\mathcal{L}_i^n - \textcolor{red}{b}r \frac{(\mathcal{L}_{i+1}^{n+1})^2}{2} + \tau \textcolor{red}{b} \frac{(\mathcal{L}_N^{n+1})^2 - (\mathcal{L}_0^{n+1})^2}{2}.$$

Для $i = N - 1$, где

$$\hat{\alpha} = \left(1 - \frac{1}{(1 + ah)^2}\right) \frac{\textcolor{red}{b}r}{2} + \frac{\tau \textcolor{red}{b}}{2(1 + ah)^2}, \quad \hat{\beta} = 1, \quad \hat{c} = -\mathcal{L}_{N-1}^n - \tau \textcolor{red}{b} \frac{(\mathcal{L}_0^{(n+1)})^2}{2}.$$

Для $i = 0$, где

$$\hat{\alpha} = \frac{\text{br}}{2} - \frac{\tau \text{b}}{2}, \quad \hat{\beta} = 1, \quad \hat{c} = -\mathcal{L}_0^n - \text{br} \frac{(\mathcal{L}_1^{n+1})^2}{2} + \tau \text{b} \frac{(\mathcal{L}_N^{(n+1)})^2}{2}.$$

Агрегат q_i^{n+1} находим так:

$$q_i^{n+1} = \frac{\ln(\mathcal{L}_i^n) - \ln(\mathcal{L}_i^{n+1})}{\tau \text{b}} + \frac{(\mathcal{L}_0^{n+1})^2 - (\mathcal{L}_N^{n+1})^2}{2\mathcal{L}_i^{n+1}}, \quad i = 0, \dots, N-1. \quad (3.8)$$

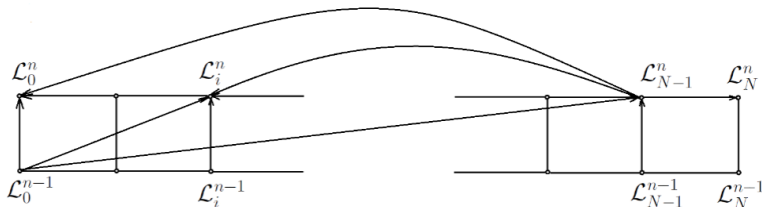
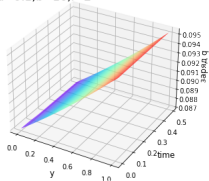


Рис 8. Схема вычислений \mathcal{L}_i^n .

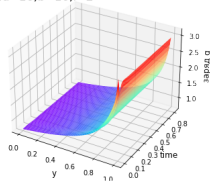
4. Результаты численных экспериментов.

method1:a=0.1,b=10,l=2



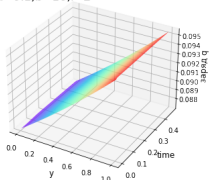
(a)

method1:a=10,b=10,l=2



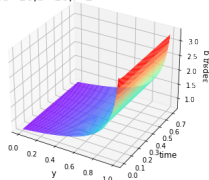
(b)

method2:a=0.1,b=10,l=2



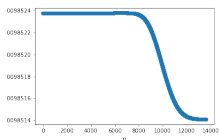
(c)

method2:a=10,b=10,l=2

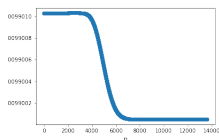


(d)

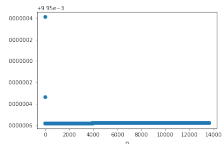
Рис 9. Сравнение значений объёмного заряда q для разных способов, наверху способ 1, внизу способ 2: (a)(b) $a = 0.1, b = 10$; (c)(d) $a = 10, b = 10$



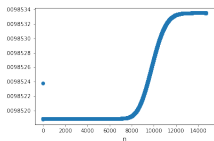
(a)



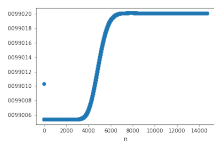
(b)



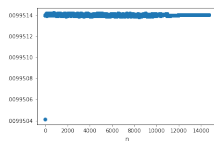
(c)



(d)



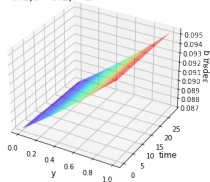
(e)



(f)

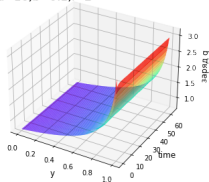
Рис 10. Сравнение значений объёмного заряда q , полученных способом 1 и способом 2 для разных y , наверху способ 1, внизу способ 2:
(a)(d) $y = 0$; (b)(e) $y = N/2$; (c)(f) $y = N$

method1:a=0.1,b=0.1,l=2



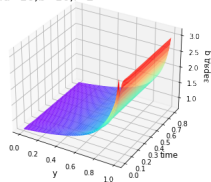
(a)

method1:a=10,b=0.1,l=2



(b)

method1:a=10,b=10,l=2



(c)

Рис 11. Решения для объёмного заряда q , полученные способом 1 :

а) $a = 0.1, b = 0.1$; (b) $a = 10, b = 0.1$; (c) $a = 10, b = 10$

Спасибо за внимание!