УДК 532.135

Нелинейная теория вязкоупругости расплавов разветвленных полимеров как следствие мезоскопического подхода к описанию их динамики

Д.А. Мерзликина[1], *Г.В. Пышнограй*[1], *Н.А. Черпакова*[2]
[1]*АлтГУ,* [2]*АлтГТУ, г. Барнаул*

В современных условиях все более важным становится проблема сокращения расходов при производстве и переработке полимеров. Решение этой задачи возможно в рамках оптимизации технологических процессов производства и переработки полимеров, что в свою очередь невозможно без построения математической модели поведения полимеров в различных условиях. Такая задача существенно усложняется при рассмотрении течений растворов и расплавов полимеров, поскольку имеют место нелинейные эффекты, которые необходимо учитывать [1–3].

Экспериментальные исследования различных полимерных жидкостей обнаруживают их нелинейное вязкоупругое поведение. Для описания такого поведения было предложено большое количество моделей, которые описывают реологическое поведение полимерных жидкостей, как на качественном, так и на количественном уровнях. Многомодовый характер динамики текучих полимерных сред или множественность релаксационных процессов проявляется уже в случае исследования течений разбавленных растворов гибкоцепных монодисперсных полимеров. Увеличение концентрации полимера в системе приводит к возникновению зацеплений макромолекул, их динамика становится более сложной, между частями макромолекулы возникают «длинномасштабные» взаимодействия. Это приводит к дополнительным слагаемым в тензоре напряжений полимерной системы или к учету новых релаксационных процессов со «сверхмедленными» временами релаксации.

Несмотря на это, в основу описания динамики концентрированных полимерных систем должна быть положена достаточно надежная реологическая модель, полученная с использованием мезоскопического подхода. В качестве такой модели в работе используется модифицированная реологическая модель Виноградова – Покровского. Особенностью этой модели является учет тензорного характера коэффициента трения бусинок, который связан с наведенной анизотропией сдвигового потока. Такая анизотропия определяется размерами и формой макромолекулярного клубка и это приводит к появлению в уравнениях динамики соответствующих коэффициентов.

Обобщение этой модели на многомодовый случай имеет вид:

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + 3\sum_{\alpha=1}^{n} \frac{\eta_\alpha}{\tau_\alpha} a_{ik}^{\alpha}, \qquad (1)$$

$$\frac{d}{dt} a_{ik}^{\alpha} - \nu_{ij} a_{jk}^{\alpha} - \nu_{kj} a_{ji}^{\alpha} + \frac{1 + (\kappa_\alpha - \beta_\alpha) a_{jj}^{\alpha}}{\tau_\alpha} a_{ik}^{\alpha} = \frac{2}{3}\gamma_{ik} - \frac{3\beta_\alpha}{\tau_\alpha} a_{ij}^{\alpha} a_{jk}^{\alpha},$$

Здесь p – гидростатическое давление; σ_{ik} – тензор напряжений полимерной системы; ν_{ik} – тензор градиентов скорости; γ_{ik} – симметризованный тензор градиентов скорости; α – порядковый номер моды; n – количество учитываемых релаксационных мод или процессов; a_{ik}^{α} – безразмерный тензор дополнительных напряжений, соответствующих вкладу с номером α; η_α – коэффициент сдвиговой вязкости моды с номером α; τ_α – время релаксации моды с номером α; $\kappa_\alpha = \kappa_\alpha(a_{jj}^{\alpha})$ и $\beta_\alpha = \beta_\alpha(a_{jj}^{\alpha})$ – параметры наведенной анизотропии, определяемые выражениями

$$\beta_\alpha(a_{jj}^{\alpha}) = \frac{f_\alpha + p_\alpha a_{jj}^{\alpha}}{1 + p_\alpha a_{jj}^{\alpha}}; \qquad \kappa_\alpha(a_{jj}^{\alpha}) = 1{,}2\beta_\alpha(a_{jj}^{\alpha}) \qquad (2)$$

При работе с выражениями (2) вначале было сделано предположение, что значения параметров наведенной анизотропии не зависят или зависят незначительно от номера моды, однако, сравнение с экспериментами показало некорректность этого предположения, соответственно, необходимо вернуться к многомодовому приближению.

Так как влияние параметров наведенной анизотропии для каждой конкретной моды неодинаково, имеет смысл рассматривать каждую моду в отдельности, что отражено при записи выражений (2). Таким образом, система уравнений (1,2) определена с точностью до параметров: η_α, τ_α, f_α, p_α, q_α, которые подлежат определению из экспериментов. Число этих параметров достаточно велико, особенно при большом числе мод.

Вначале рассмотрим, как определить параметры η_α, τ_α. Это размерные параметры: η_α имеет размерность вязкости, τ_α – размерность времени. Для того чтобы подобрать значения параметров анизотропии были изучены вклады каждой из мод и значения f_α и p_α определялись на каждом из участков зависимости стационарной вязкости при одноосном растяжении. При этом было получено, что как f_α, так и p_α являются немонотонными функциями номера моды α. Вначале эти параметры возрастали с ростом α, а затем начинают убывать. При этом их максимумы приходятся на середину интервала изменения $\alpha = 5$. Поэтому в работе для этих параметров использовались выражения:

$$f_\alpha = \frac{B}{1+(\alpha-\alpha_0)^2}; \quad p_\alpha = \frac{P}{1+(\alpha-\alpha_0)^2}.$$

При построении графиков, отражающих указанные зависимости, видно, что зависимость стационарной вязкости при растяжении носит немонотонный характер с одной или несколькими точками перегиба. С ростом параметра B величина максимума на этой зависимости уменьшается. При $P = 0$ немонотонный характер зависимости изменяется на монотонный. Таким образом, видно, что подбором параметров B и P можно достаточно точно описать зависимость стационарной вязкости от скорости растяжения.

Также были построены градиентные зависимости вязкостей при сдвиге и растяжении, из которых видно, что модель (1) с достаточной точностью описывает аномалию сдвиговой вязкости и немонотонную зависимость элонгационной вязкости. При этом видно, что для модели (1) выполняется правило Кокса-Мерца(Cox-Merz) [4]. Также были приведены нестационарные зависимости установления вязкости и коэффициента первой разности нормальных напряжений при простом сдвиге. Из расчетов видно, что при малых скоростях сдвига наблюдается монотонный выход измеряемых значений на стационарное значение, а при больших скоростях сдвига измеряемые зависимости проходят через максимум.

Таким образом, можно сделать вывод, что хотя предложенная многомодовая модель и получена, как развитие теоретических представлений о динамике линейных полимерных цепей, тем не менее, она позволяет достаточно точно описывать стационарные и нестационарные зависимости вискозиметрических функций расплавов разветвленных полимеров. При этом следует ожидать, что полученная здесь модель окажется пригодной и для концентрированных растворов и расплавов линейных полимеров. Также можно использовать эту модель и для моделирования более сложных течений текучих полимерных сред.

Авторы выражают глубокую признательность Сибирскому суперкомпьютерному центру за возможность проведения расчетов. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 18-31-00030 мол_а).

Библиографический список

1. Franosch T., Grimm M., Belushkin M., Mor F. M., Foffi G., Forr L., Jeney S. Resonances arising from hydrodynamic memory in Brownian motion // Nature. – 2011. – № 478. – P. 85–88.

2. Макаров И. А. Численное моделирование встречных потоков вязкоупругой жидкости с использованием метода корреляции давления // Механика жидкости и газов. – 2011. – №6. – С. 31–42.

3. Директор Л.Б., Майков И.Л. Численное моделирование динамики капли вязкой жидкости // Известия Российской академии наук. Механика жидкости и газа. – 2009. – № 5. – С. 101–109.

4. Leonov A.I., Prokunin A.N. Nonlinear Phenomena in Flows of Viscoelactic Polymer Fluids // New York: Chapman and Hall, 1994. – P. 297.

УДК 532.59

Численное моделирование динамики областей перемешанной жидкости ненулевой плавучести в линейно стратифицированной среде

***Н.П. Мошкин*[1,4]*, А.В. Фомина*[2]*, Г.Г. Черных*[3,4]**

[1]*ИГ им. М.А. Лаврентьева СО РАН, г. Новосибирск;*
[2]*Новокузнецкий институт (филиал) КемГУ, г. Новокузнецк;*
[3]*ИВТ СО РАН, г. Новосибирск;* [4]*НГУ, г. Новосибирск*

Эволюция пятен ненулевой плавучести (термиков) играет важную роль при формировании тонкой структуры вод океана, образовании облаков и во многих других природных явлениях [1]. В работе построена численная модель плоского термика и представлены результаты расчетов, иллюстрирующие картину генерируемых термиком внутренних волн.

Для описания течения используются хорошо известные уравнения Навье-Стокса в приближении Обербека-Буссинеска

$$\frac{\partial u}{\partial t}+u\frac{\partial u}{\partial x}+w\frac{\partial u}{\partial z}+\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p_1}{\partial x}=\nu\left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 u}{\partial z^2}\right), \qquad (1)$$

$$\frac{\partial w}{\partial t}+u\frac{\partial w}{\partial x}+w\frac{\partial w}{\partial z}+\frac{1}{\rho_0}\frac{\partial p_1}{\partial z}=\nu\left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 w}{\partial z^2}\right)-g\frac{\rho_1}{\rho_0}, \qquad (2)$$

$$\frac{\partial u}{\partial x}+\frac{\partial w}{\partial z}=0,\quad \frac{\partial \rho}{\partial t}+u\frac{\partial \rho}{\partial x}+w\frac{\partial \rho}{\partial z}=0. \qquad (3)$$