

Библиографический список

1. Бахвалов Н.С., Эглит М.Э. Процессы в периодических средах, не описываемые в терминах средних характеристик // Докл. АН СССР. – 1983. – Т. 268. – №4. – С. 836–840.
2. Саженов С.А. Версия усредненной модели Бахвалова–Эглит с уравнением эволюции осцилляций // Дифференц. уравн. – 2012. – Т. 48. – №5.

Стохастическая динамика линейной макромолекулы в окружении себе подобных

Ю.Б. Трегубова

АлтГТУ, г. Барнаул

Работа посвящена изучению динамики линейной макромолекулы в рамках микроструктурного подхода на основе метода броуновской динамики.

Всякая макромолекула может быть эффективно представлена как цепочка связанных броуновских частиц (так называемая модель гауссовых субцепей или шариков и пружинки [1]). При этом макромолекула разбивается на N субцепей длиной M/N каждая, а поведение макромолекулы описывается движением линейной цепочки из $N+1$ броуновских частиц, связанных между собой последовательно упругими силами.

Конкретизация функций, определяющих физические характеристики вещества, осуществляется в рамках микроструктурного (статистического) подхода. Такой подход позволяет учитывать как молекулярное строение вещества, так и процессы межмолекулярного взаимодействия.

Пренебрегая взаимным гидродинамическим взаимодействием частиц в линейном по скоростям приближении, динамика единичной цепочки может быть описана набором стохастических уравнений [1]

$$m \frac{d^2 r_i^\alpha}{dt^2} = -\zeta \dot{r}_i^\alpha + F_i^\alpha + G_i^\alpha - 2\mu T A_{\alpha\gamma} r_i^\gamma + \varphi_i^\alpha(t), \quad (1)$$

$$\alpha = 0, 1, \dots, N,$$

где m – масса броуновской частицы, которая моделирует участок макромолекулы длины M/N , r^α и \dot{r}^α – координаты и скорость броуновской частицы, ζ – коэффициент трения в «мономерной» жидкости, F_i^α

и G_i^α – эффективные силы соседних макромолекул: F_i^α – сила гидродинамического увлечения, G_i^α – сила внутренней вязкости; φ_i^α – случайная сила, $2T\mu$ – коэффициент упругости пружины между соседними частицами, T – температура в энергетических единицах. Матрица $A_{\alpha\gamma}$ описывает соединение броуновских частиц в единую цепочку.

Случайная сила в уравнениях (1) может быть представлена как сумма двух независимых процессов: первое слагаемое – это гауссовский дельта-коррелированный процесс, второе – также гауссовский, но не коррелированный процесс.

Решения уравнений (1) были получены в виде значений величины смещения центра масс макромолекулы методом Рунге-Кутты.

Результаты вычислений не зависят от числа N ($N > 2$) субцепей в моделируемой макромолекуле, что позволяет утверждать о корректности выбранной модели макромолекулы и схемы описания динамики ее поведения.

В [1] подробно рассматривается аналитическое выражение для вычисления среднего смещения центра масс макромолекулы, которое имеет вид

$$\langle R \rangle = 6D_0 \frac{\tau}{B} \left(\frac{t}{\tau} + 1 - e^{-tB/\tau} \right), \quad (2)$$

где D_0 – коэффициент диффузии, B – мера увеличения коэффициента трения частицы, τ – время релаксации среды.

Было проведено усреднение полученных смещений центра масс макромолекулы и сравнение их с результатами аналитического решения [2].

Результаты аналитического и численного решений очень близки. В обоих случаях имеется ярко выраженный горизонтальный участок (плато). До него численное и аналитическое решения имеют одинаковый характер, а далее они практически совпадают, что позволяет говорить о существовании некоторого единого характерного времени релаксации, что не противоречит известным экспериментальным и теоретическим данным [3].

Библиографический список

1. Pokrovskii V.N. A justification of the reptation-tube dynamics of a linear macromolecule in the mesoscopic approach // *Physica*. – 2006. – V.A366. – P. 88–106.

2. Трегубова Ю.Б., Алтухов Ю.А., Третьяков И.В. К обоснованию репационного механизма диффузии линейной макромолекулы в теории микровязкоупругости // ФПСМ. – 2011. – №4. – С. 27–31.

3. Покровский В.Н. Reptation and diffusive modes of motion of linear macromolecules // ЖЭТФ. – 2008. – №3. – Т. 133. – С. 696–700.

Математическое моделирование процесса формирования полимерных пленок в одномерном приближении с учетом теплопереноса

И.В. Третьяков
АлтГТУ, г. Барнаул

В работе было рассмотрено течение полимерной жидкости в одномерном приближении соответствующее процессу формирования полимерной пленки.

При описании процесса формирования полимерной пленки учтено, что получаемая пленка охлаждается и, одновременно, подвергается растяжению.

Для нахождения установившихся напряжений при растяжении была использована обобщенная реологическая модель Виноградова-Покровского [1], параметры которой являются известными функциями температуры.

$$\sigma_{ik} = -p\delta_{ik} + 3\frac{\eta_0}{\tau_0}a_{ik};$$

$$\frac{d}{dt}a_{ik} - v_{ij}a_{jk} - v_{kj}a_{ji} + \frac{1+(\kappa-\beta)I}{\tau_0}a_{ik} = \frac{2}{3}\gamma_{ik} - 3\frac{\beta}{\tau_0}a_{ij}a_{jk},$$
(1)

где σ_{ik} – тензор напряжений; p – гидростатическое давление; η_0 и τ_0 – начальные значения сдвиговой вязкости и времени релаксации; v_{ik} – тензор градиентов скорости; a_{ik} – симметричный тензор анизотропии второго ранга; $I=a_{ij}$ – первый инвариант тензора анизотропии; $\gamma_{ik} = \frac{1}{2}(v_{ik} + v_{ki})$ – симметризованный тензор градиентов скорости; κ, β – феноменологические параметры модели, учитывающие в уравнениях динамики макромолекулы размеры и форму молекулярного клубка.

Была показана возможность использования модифицированной реологической модели Виноградова-Покровского для описания тече-