Федеральное агентство по образованию Российской Федерации

Государственное образовательное учереждение высшего профессионального образования “Московский физико-технический институт (государственный университет)”

Выпускная квалификационная работа на степень бакалавра

Исследование статистических свойств тензора напряжений раствора полимеров

Студент 028 гр. Качалов В.Н.

Научный руководитель:

д.ф.-м. н. Колоколов И.В.

Москва 2014

Содержание

1 Введение

В этой работе мы рассматриваем статистические свойства тензора напряжений раствора полимеров (в работе обозначен как T_{ik}) в двумерном потоке и в одномерном, в случаях когда получение аналитического решения для многомерья затруднительно. Поток состоит из флуктуационной скорости с наложенной на неё сдвигой частью. Жидкость мы считаем несжимаемой, а поле скорости гладким. Интерес в изучении свойств данной величины состоит в том, что в растворе полимеров наблюдались сильные отличия от ньютоновской жидкости, например поток становится турбулентным при малых числах Рейнольдса, подробнее отличия в экспериментах Гройсмана и Штейнберга описаны в [1][2].

Мы попробуем описать эту систему с помощью следующей феноменологической модели.

Запишем уравнение Навье-Стокса и уравнение на тензор напряжений. Уравнение (1.2) написано из соображений, что $T \propto R^2$где R- размер клубка.[12]

$$\begin{cases} \partial_t v_i = -v_k \partial_k v_i - \partial_i p - \partial_k T_{ik} + \eta \triangle v_i & (1.1) \\ \partial_t T_{ij} = \Sigma_{ik} T_{kj} + \Sigma_{ik} T_{jk} - \frac{2}{\tau} T_{ij} & (1.2) \\ \partial_i v_i = 0 & (1.3) \end{cases}$$

Где тензор имеет вид$T_{ik} = A R_i R_k$. (2)

$\Sigma_{ik} = \partial_i v_k$.(3)

Сразу рассмотрим, как входит T в уравнение Навье-Стокса.

$\partial_t v_i = -v_k \partial_k v_i - \partial_i p - \partial_k T_{ik} =$

$= -v_k \partial_k v_i - \partial_i p - \partial_k (\frac{a+c}{2} \sigma_0 + b\sigma_1 + \frac{a-c}{2} \sigma_3) =$

$= -v_k \partial_k v_i - \partial_i (p + \frac{a+c}{2}) - \partial_k (b\sigma_1 + \frac{a-c}{2} \sigma_3)$ (4)

Получаем, что эффективно входит только бесследовая часть, в то время как часть описываемая коэффициэнтом при σ_0 дает лишь перенормировку давления. Для наглядности, распишем дивергенцию от обоих частей уравнения(1.1), что бы получить условие задающееся несжимаемостью

$\partial_i \partial_t v_i = -\partial_i v_k \partial_k v_i - \partial_i \partial_i p - \partial_i \partial_k T_{ik} + \eta \partial_i \triangle v_i$

Левая часть и часть с диссипацией равны 0 из условия(1.3) несжимаемости жидкости. Правая переписывается так, что получается уже указанная перенормировка.

$0 = -\partial_i v_k \partial_k v_i - \triangle(p + \frac{a+c}{2}) - \partial_i \partial_k (b\sigma_1 + \frac{a-c}{2} \sigma_3) = -\partial_i v_k \partial_k v_i - \triangle(\widetilde{p}) - \partial_i \partial_k (b\sigma_1 + \frac{a-c}{2} \sigma_3)$ (5)

2 Расчет среднего T

Из уравнения (1.2) можно получить уравнение на среднее значение T . Исходя из тех предположений, что мы сделали о виде тензора T и опираясь на результат полученный в [3], мы должны получить зависимость от времени вида$T \propto Aexp(-\frac{t}{2\tau} + 2\lambda_1)$.

Уравнение на T имеет вид.

$\partial_t T_{ij} = \Sigma_{ik} T_{kj} + \Sigma_{ik} T_{jk} - \frac{2}{\tau} T_{ij}$

Где

$\Sigma_{ik} = \sigma_{ik} + S\delta_{xi}\delta_{yk}$ (7)

S - сдвиговая компонента поля скорости.

σ - матрица производных флуктуационной скорости (δ- коррелированна по времени).

Корреляционная функция σ для двухмерного случая [3]

$< \sigma_{ik}(t_1)\sigma_{lm}(t_2) >= D(3\delta_{il}\delta_{km} - \delta_{im}\delta_{kl} - \delta_{ik}\delta_{lm})\delta(t_1 - t_2)$ (8).

В начале сделаем подстановку и избавимся от члена с временем релаксации.

$T = Ke^{-\frac{2t}{\tau}}$(9)

Проведем дальнейший вывод уравнения на K, аналогично выводу уравнения Фоккера-Планка в [8].

Для этого представим K в виде.

$K_{ij}(t) = K_{ij}(t - \Delta t) + \int\limits_{t-\Delta t}^{t} \Sigma_{ik}(s) K_{kj}(s) ds + \int\limits_{t-\Delta t}^{t} \Sigma_{ik}(s) K_{jk}(s) ds$

Где время Δt выбранно так, что $\Sigma(t)$ и $K(t - \Delta t)$не коррелируют.

$< \Sigma(t) K(t - \Delta t) >= 0$ (11)

Тогда подставив данное выражение получим.

$< \partial_t K_{ij} >=< \Sigma_{ik}(t) \int \Sigma_{km}(s) K_{mj}(s) ds > + < \Sigma_{ik}(t) \int K_{km}(s) \Sigma_{jm}(s) ds >$
$+$

$+ < \Sigma_{jm}(t) \int \Sigma_{ik}(s) K_{km}(s) ds > + < \Sigma_{jm}(t) \int K_{ik}(s) \Sigma_{mk}(s) ds >=$

Воспользуемся соотношением на корреляционную функцию (8).

$=< \partial_t K_{ij} >= 2S^2 \delta_{ix}\delta_{jx} \int K_{yy}(s) ds + 3DK_{kk}\delta_{ij} - 2DK_{ij} + S(\delta_{ix} K_{yj}(t - \Delta t) + \delta_{jx} K_{yi}(t - \Delta t))$ (10)

Расписывая покоординатно запишем систему уравнений.

$K = \begin{Vmatrix} a & b \\ b & c \end{Vmatrix}$

$$\begin{cases} \dot{a}(t) = 3D(a(t) + c(t)) - 2Da(t) + 2S^2 \int c(s) \\ \dot{b}(t) = -2Db(t) + Sc(t - \Delta t) \\ \dot{c}(t) = 3D(a(t) + c(t)) - 2Dc(t) \end{cases}$$

Как видно уравнения (5.1) и (5.3) отделяются, это позволяет их переписать в виде.

$x(t) = a(t) + c(t)$

$$\begin{cases} \dot{x} = 4Dx + 2S^2C & (11.1) \\ \ddot{C} = 3Dx - 2D\dot{C} & (11.2) \end{cases}$$

Где C - первообразная от c.

$C(t) - C(t-\Delta t) = \int_{t-\Delta t}^{t} c(s)ds$

$C(t-\Delta t) = 0$

Тогда переписывая уравнения (11).

$\dddot{C}(t) - \ddot{C}(t)2D - 8D^2\dot{C}(t) - 6DS^2C(t) = 0$

Отметим, что собственное число данного дифференциального уравнения является ляпуновской экспонентой.

$\lambda^3 - 2D\lambda^2 - 8D^2\lambda - 6DS^2 = 0$

Сделаем подстановку для удобства вычислений.

$\alpha = \frac{S}{D}$

Тогда можно записать решение кубического уравнения по формуле Кардано.

$$\lambda = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{Q}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{Q}} = \sqrt[3]{-\frac{q}{2} + \sqrt{(\frac{p}{3})^3 + (\frac{q}{2})^2}} + \sqrt[3]{-\frac{q}{2} - \sqrt{(\frac{p}{3})^3 + (\frac{q}{2})^2}} =$$

$$= D\left(\sqrt[3]{\frac{160+162\alpha^2}{54} + \sqrt{-(\frac{28}{9})^3 + (\frac{160+162\alpha^2}{54})^2}} + \sqrt[3]{\frac{160+162\alpha^2}{54} - \sqrt{-(\frac{28}{9})^3 + (\frac{160+162\alpha^2}{54})^2}}\right) =$$

$$\lambda = \frac{D}{3}\left(\sqrt[3]{80 + 81\alpha + \sqrt{15552 - 12960\alpha^2 + 6561\alpha^4}} + \sqrt[3]{80 + 81\alpha - \sqrt{15552 - 12960\alpha^2 + 6561\alpha^4}}\right)$$

В случае большой сдвиговой компоненты получается 1 вещественный корень равный.

$\lambda \approx -\sqrt[3]{6DS^2}$ (12)

И при малой сдвиговой компоненте корней уравнения будет 3, наибольший из них (важна только наибольшая ляпуновская экспонента.)

$\lambda \approx \frac{D}{3}(10.8 + \alpha 0.73)$ (13)

При ее отсутсвии, уравнение перейдет в квадратное.

$\lambda = \pm 2D$ (14)

Решение дифференциального уравнения (10) на $< K >$ в итоге запишется как.

$$\begin{cases} x = \frac{\lambda c(0)e^{\lambda t} + 2Dc(0)e^{\lambda t}}{3D} & (15.1) \\ c(t) = c(0)e^{\lambda t} & (15.2) \\ a(t) = \frac{\lambda c(0)e^{\lambda t} - Dc(0)e^{\lambda t}}{3D} & (15.3) \\ b(t) = \frac{(\lambda b(0) - Sc(0) + 2D)}{\lambda}e^{-2Dt} + \frac{Sc(0) - 2D}{\lambda}e^{\lambda t} & (15.5) \end{cases}$$

Из полученного условия в пункте 1 получаем, что эффективно входящая бесследовая часть имеет вид.

$exp(-\frac{t}{2\tau})(b\sigma_1 + \frac{a-c}{2}\sigma_3) =$

$= exp(-\frac{t}{2\tau})(\frac{(\lambda b(0)-Sc(0)+2D)}{\lambda}e^{-2Dt}+\frac{Sc(0)-2D}{\lambda}e^{\lambda t})\sigma_1+\frac{(\lambda c(0)-4Dc(0))e^{\lambda t}}{6D}\sigma_3)(16)$

3 Учет наибольшего растяжения в одномерной модели

Ранее мы считали, что время релаксации является постоянной величиной, и сила возвращающая полимер в исходное состояние от времени не зависит. В такой модели при численных расчетах получается достаточно большой хвост в районе сильнорастянутых полимеров [9]. В реальности это не так и существует некая длина больше которой полимер не расстягивается, на ней он либо рвется, либо уже не описывается подобными уравнениями.

Для описания системы с некоторой максимальной длинной растяжения мы воспользуемся такой моделью, в которой $\tau = \tau_0(1 - \mu^2 trT^2)$, где τ_0 время релаксации в отсутствии растяжения, параметр μ в данном случае определяет максимальную длину растяжения. Подставляя подобное выражение в матричное уравнение (1.2) мы получим довольно сложную систему уравнений, для которой будет достаточно затруднительно получить аналитически какие либо результаты. Основные свойства можно понять на одномерной модели, с мультипликативным шумом поэтому. Воспользуемся ей для получения функции плотности вероятности.

Уравнения тогда примут вид.

$$\begin{cases} \partial_t x = -\frac{x}{\tau_0(1-\mu^2 x^2)} + Cx + \zeta(t)x & (17.1) \\ <\zeta(t)>= 0 & (17.2) \\ <\zeta(t_1)\zeta(t_2)>= C\delta(t_1 - t_2) & (17.3) \end{cases}$$

Для данной системы можно записать уравнение Фоккера-Планка. Для этого произведем замену переменных, что бы сделать шум из мультипликативного аддитивным.

$$\begin{cases} y = ln(x) \\ \partial_t y = -\frac{1}{\tau(1-\mu^2 e^{2y})} + C + \zeta(t) \end{cases}$$

Тогда уравнение Фоккера-Планка будет иметь вид.

$\partial_t P(y,t) = \partial_y(\frac{P(y,t)}{\tau_0(1-\mu^2 e^{2y})} - CP(y,t) + C\partial_y P(y,t))$ (18)

На больших временах распределение полимеров по длинам имеет стационарный вид. Будем искать стационарное решение из уравнения (поддиференциальная правая часть равна константе).

Рассмотрим 2 варианта.

1) Равновесный случай

$J = 0$ тока нет, тогда уравнение примет вид.

$CP'(y) - CP(y) + \frac{P(y)}{\tau_0(1-\mu^2 e^{2y})} = 0$

Тогда решение

$P(x) = Qx^{1-\alpha}(1-\mu^2x^2)^{\frac{\alpha}{2}}$(19)

где $\alpha = \frac{1}{C\tau_0}$.

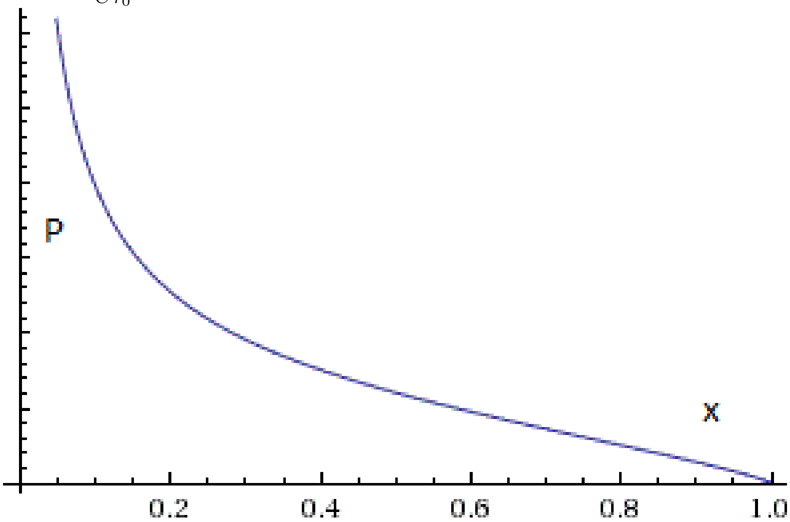

Рис.1

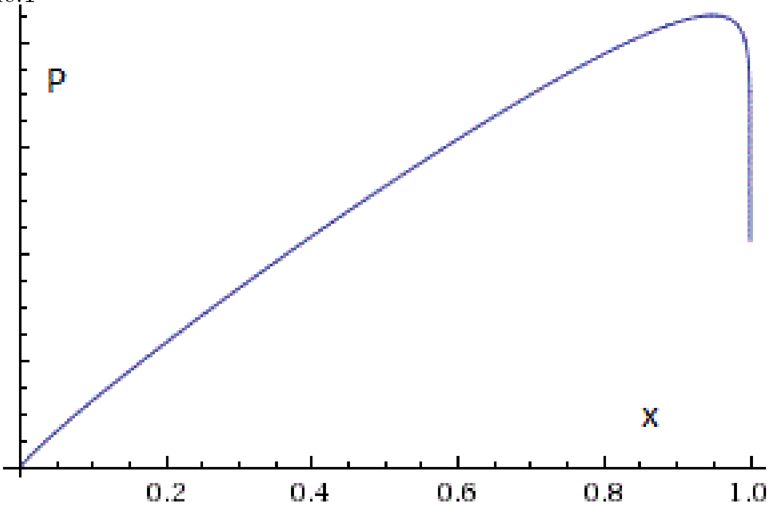

Рис.2

На графиках показаны режимы с $\alpha = 1.6$(докритический режим)$\alpha = 0.1$ (закритический режим)($\mu = 1$).

Отсюда получаем что$\alpha > 1$ соответствует докритическому режиму [5], так как в таком случае функция имеет особую точку в нуле, что соответствует тому, что большинство полимеров нерастянуто. В случае $\alpha < 1$ происходит переход, и функция принимает другой вид, с максимумом при $x_m = \sqrt{1-\alpha}$, что соответсвует закритическому режиму. Получается, что параметр α соответствует $\frac{1}{Wi}$ из[5].

Так же отметим, что при $\mu = 0$, ответ сводится к полученному в [3], где разобран случай постоянного времени релаксации.

Может возникнуть вопрос, что произойдет в сильно-докритическом режиме($\alpha \geq 2$), так как полная вероятность равна 1.

$1 = \int\limits_0^1 P(x)dx (20)$

А в данном случае неопределенного интеграла не существует. Обрезка в данном случае задается условием существования некого минимального размера полимера x_0, существующего так как полимер не может сжаться в точку. Это означает, что интеграл будет существовать всегда.

Еще отметим, что

2)Неравновесный случай

Рассмотрим случай в котором $J \neq 0$. Уравнение на функцию плотности вероятности примет вид.

$CP'(y) - CP(y) + \frac{P(y)}{\tau_0(1-\mu^2 e^{2y})} = J$

Тогда функция плотности вероятности принимает вид

$P(x) = Q(x) * x^{-\alpha}(1-x^2)^{-\frac{\alpha}{2}}$

Где

$Q(x) = \int dx(x)^{\alpha-1}(1-\mu^2x^2)^{\frac{\alpha}{2}} = \frac{F(\frac{\alpha}{2},\frac{\alpha}{2},\frac{\alpha+2}{2},\mu^2x^2)x^{\alpha}}{\alpha}$

$F(a,b,c,z)$ - гипергеометрическая функция.

Откуда следует, что

$P(x) = x * F(\frac{\alpha}{2},\frac{\alpha}{2},\frac{\alpha+2}{2},\mu^2x^2) * (1-\mu^2x^2)^{\frac{\alpha}{2}} (21)$

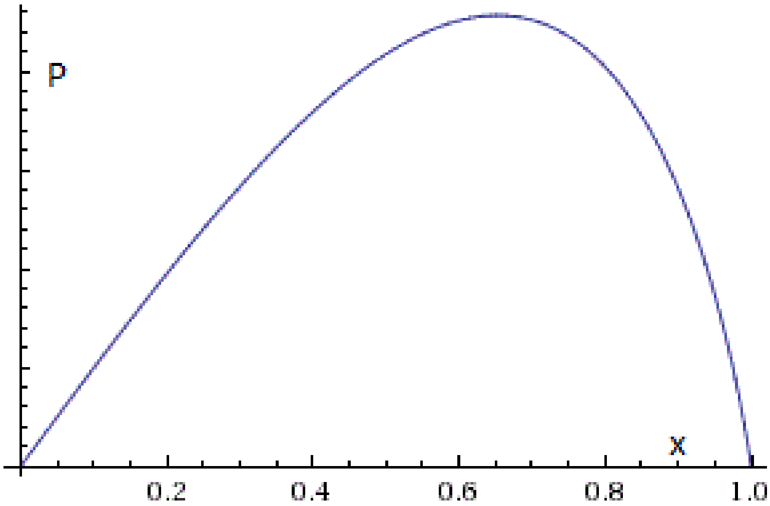

Рис. 3

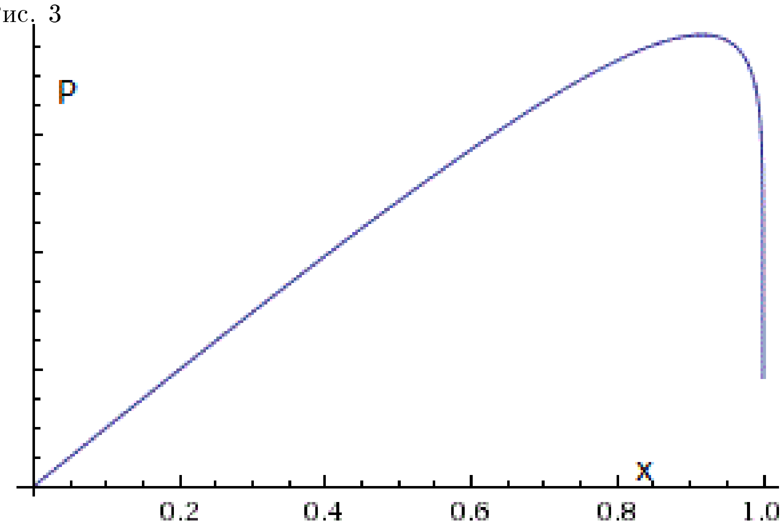

Рис.4

На рис.3 и рис.4 показаны режимы с $\alpha = 3.2$(докритический режим)$\alpha = 0.2$ (закритический режим) соответственно($\mu = 1$).

Поскольку вид гипергеометрических функций нетривиален рассмотрим их ассимтотики при больших и малых α.

Случай $\alpha \to 0$.

$F(\frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha+2}{2}, x^2) \to 1 + \frac{\alpha^2}{4}\sum\limits_{n=1}^{\infty}(\frac{x^{2n}}{n^2})$

Тогда.

$P(x) \simeq x * (1 + \frac{\alpha^2}{4}\frac{x^2}{4}) * (1 - \mu^2 x^2)^{\frac{\alpha}{2}}$ (21)

Случай больших α ($\alpha \gg 1$)

$F(\frac{\alpha}{2},\frac{\alpha}{2},\frac{\alpha+2}{2},x^2) \to exp(\frac{\alpha x^2}{2})$

Что верно при малых $x(x \ll \alpha)$, в нашем случае, данное условие автоматически выполненно так как x меньше 1.

Тогда приближенный вид решения при больших α.

$P(x) \approx x * exp(\frac{\alpha x^2}{2})(1-x^2)^{\frac{\alpha}{2}}$ (22)

Заметим, что физически пункт 1) соответствует случаю, когда с полимером ничего не происходит при растягивании до максимального размера. Пункт 2) соответсвует наличию вероятности разрыва полимеров в точке максимума, и "вбрасыванию" новых полимеров. Данный случай ближе к реальности (например некоторые свойства полимеров используют при прокачке нефти).

Так же отметим, что имеется серьезное различие вида функций плотности вероятности в докритическом режиме в случаях 1) и 2). Как видно из графиков и выражения для ассимтотик, полученного аналитически, в случае 2) не наблюдается наличия большого количества нерастянутых полимеров, то есть, появление возможности разрыва приводит к "оттягиванию" полимеров от 0.

4 Старшие моменты

Рассмотрим задачу нахождения функции распределения вероятности для старших моментов$z = x^n$.

Уравнение на старшие моменты имеет вид.

$$\begin{cases} \partial_t z = -\frac{nz}{\tau_0(1-z^{\frac{2}{n}})} + Cnz + n\zeta(t)z & (23.1) \\ < \zeta(t) >= 0 & (23.2) \\ < \zeta(t_1)\zeta(t_2) >= C\delta(t_1 - t_2) & (23.3) \end{cases}$$

Сделаем замену, таким образом относительно новой пременной шум аддитивный.

$$\begin{cases} q = ln(z) \\ \partial_t q = -\frac{n}{\tau_0(1-e^{\frac{2q}{n}})} + nC + n\zeta(t) \end{cases}$$

Уравнение Фоккера-Планка тогда будет записано как.

$\partial_t P(q,t) = \partial_y(-nCP(q,t) + \frac{nP(q,t)}{\tau_0(1-e^{\frac{2q}{n}})} + n^2C\partial_y P(q,t))$ (24)

Стационарное решение будет найдено из уравнения.

$n^2CP'(q) + n\frac{P(q)}{\tau_0(1-e^{\frac{2q}{n}})} - nCP(q) = J$

Как и в предыдущей части будет два случая - равновесный и неравновесный.

1)Равновесный случай

$J = 0$ тока нет, тогда решение примет вид.

$P(z) = Qz^{1-\frac{\alpha}{n}}(1-z^{\frac{2}{n}})^{\frac{\alpha}{2}}$ (25)

Как уже было сказано ранее, в реальности в точке 0 особенности не будет в силу невоможности сжать полимер в точку.

2)Неравновесный случай

Рассмотрим случай в котором $J \neq 0$. Тогда решение запишется в виде

$P(z) = Q(z) * z^{1-\frac{\alpha}{n}}(1 - z^{\frac{2}{n}})^{\frac{\alpha}{2}}$

где

$Q(z) = F(\frac{\alpha-2n}{2}, \frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha-2n+2}{2}, z^{\frac{2}{n}})z^{\frac{\alpha-2n}{2}}$

Тогда финальный ответ

$P(z) = z^{1-\frac{\alpha}{n}}(1 - z^{\frac{2}{n}})^{\frac{\alpha}{2}} * F(\frac{\alpha-n}{2}, \frac{\alpha}{2}, \frac{\alpha-n+2}{2}, z^{\frac{2}{n}})z^{\frac{\alpha-2n}{2}}$ (26)

5 Заключение

В части 2 мы получили экспоненциальную зависимость T от времени и величину ляпуновской экспоненты, соответсвует предыдущим результатам например полученным [7]. К сожалению, в силу незнания того, как подробно выглядит T, и незнания численных значений коэффициэнтов стоящих в (2) не удалось получить результаты подходящие для дальнейшего анализа уравнения Навье-Стокса, с целью обьяснить некоторые свойства раствора полимеров.

В части 3 полученны достаточно интересные результаты, сходящиеся с раннее полученными в [3], при $\mu = 0$. Отметим, так же, что найденное равновесное аналитическое решение при докритических параметрах сходится с полученнным численным для многомерного случая в [5]. Закритический случай в данной модели дал результат несколько отличный от численного в [5] - один максимум вместо двух, при увелечении Wi переходящих в один близкий к 1, что по видимому связано с переходом от многомерного к одномерному уравнению. Однако одномерный случай позволил пронаблюдать некоторые свойства функции плотности вероятности, при условии небесконечной растяжимости полимера, например такие как наличие критических соотношений C и τ_0, при которых картина распределения сильно меняется.

В части 4 получен достаточно простой, но важный ответ, что распределение стауионарное распределение старших моментов всегда существует.

6 Список литературы

[1]A. Groisman, V Steinberg. “Elastic turbelence in a polymer solution flow” Nature 405 53 (2000).

[2]A. Groisman, V Steinberg. “Stretching of polymers in a random three-dimensional flow”, Phys. Rev. Lett. 86 934 (2001).

[3]В.В.Лебедев. “Флуктуационные эффекты в макрофизике” МЦНМО 2004.

[4]G. Falkovich, K. Gawedzki and M. Vergassola. “Particles and fields in fluid turbulence”,Rev. Mod. Phys. 73 913 (2001) .

[5]M. Chertkov I. Kolokolov V. Levedev K. Turitsyn. “Polymer statistics in a random flow with mean shear”., J. Fluid Mech., 531, 251-260 (2005).

[6]M. Chertkov. “Polymer stretching by turbulence”. Phys. Rev. Lett. 84, 4761–4764.

[7]K. S. Turitsyn, “Polymer dynamics in chaotic flows with a strong shear component”, ZhETF 132 746 (2007) [JETP 105 655 (2007)]

[8]И. В. Колоколов, Е. Г. Образовский, Е. В. Подивилов “Физическая кинетика” Учеб. пособие/ МФТИ; Новосиб. гос. ун-т. М.; Новосибирск, 2009.

[9] J. Davoudi and J. Schumacher “Stretching of polymers around the Kolmogorov scale in a turbulent shear flow” arxiv: http://arxiv.org/abs/nlin/0601004

[10] E. Balkovsky, A. Fouxon, and V. Lebedev, “Turbulent dynamics of polymer solutions,” Phys. Rev. Lett. 84, 4765 (2000).

[11]G. Falkovich, M.Vergassola “Lagrangian Description of Transport in Turbulence” (курс лекций)

[12]Bird, R.B., Curtiss, C.F., Armstrong, R.C., & Hassager 1987 Dynamics of Polymeric Liquids Wiley, New York.