

математического программного обеспечения, получаем результат, изображенный на рисунке 3.

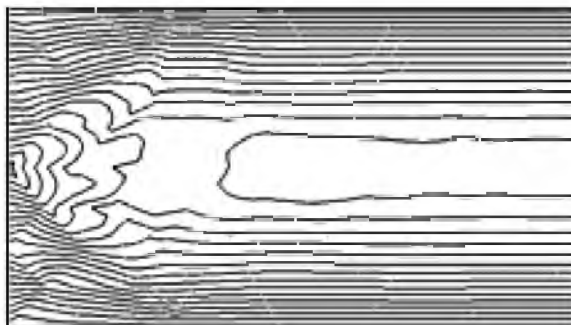


Рис. 3. Результат расчета

Библиографический список

1. Егоров В.И. Применение ЭВМ для решения задач теплопроводности: учебное пособие. – СПб.: СПб ГУ ИТМО, 2006. – 77 с.
2. Пышнограй Г.В. Математические основы реологии полимерных сред: учебное пособие для студентов специальности «Прикладная математика» / Рубцовский индустриальный институт. – Рубцовск: РИО, 1999. – 84 с.
3. Кузнецова Ю.Л., Скульский О.И., Пышнограй Г.В. Течение нелинейной упруговязкой жидкости в плоском канале под действием заданного градиента давления // Вычислительная механика сплошных сред. – 2010. – Т. 3, №2. – С. 55-69.

Стохастическая динамика линейных макромолекул в одномолекулярном приближении¹

Ю.Б. Трегубова
АлтГТУ, г. Барнаул

Работа посвящена изучению динамики линейных макромолекул в одномолекулярном приближении.

Каждая макромолекула может быть эффективно представлена в виде цепочки связанных броуновских частиц. При этом макромолекула разбивается на N субцепей длиной M/N каждая, а поведение макромолекулы описывается движением линейной цепочки из $N+1$ броунов-

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 09-01-00293.

ских частиц, связанных между собой последовательно упругими силами.

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

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

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

где m – масса броуновской частицы, связанной с кусочком макромолекулы длины M/N , r^α и \dot{r}^α – координаты и скорость броуновской частицы, $\zeta \dot{r}_i^\alpha$ – сопротивление «мономерной» жидкости, F_i^α и G_i^α – эффективные силы соседних макромолекул: F_i^α – сила внешнего сопротивления, G_i^α – сила внутреннего сопротивления; 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 4 порядка.

Результаты обнаруживают существование в теории характерного масштаба, который можно толковать как диаметр «трубки» в рептационной теории Д'Жена [2]. Они указывают на наличие диффузного механизма движения макромолекулы, и правомерность введения в рассмотрение времен релаксации τ_V .

Также для модели полимерной системы возможно введение некоторого единого характерного времени релаксации, что не противоречит известным экспериментальным и теоретическим данным [3].

Библиографический список

1. Pokrovskii V.N. A justification of the reputation-tube dynamics of a linear macromolecule in the mesoscopic approach // *Physica*. – 2006. – V. A366. – P. 88-106.
2. De Gennes P.G. *Scaling Concepts in Polymer Physics*. – Ithaca, NY: Cornell Univ. Press, 1979.
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 условиях двуосного растяжения с учетом теплопереноса¹

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. Поэтому, при математическом моделировании этих процессов, необходимо совместное решение уравнений для на-пряжений и теплопереноса.

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;

¹ Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант № 09-01-00293.