



ایجاد شرایط اولیه برای شبیه‌سازی سوسپانسیون پلیمری به کمک تابع توزیع احتمال تعادلی

امین موسائی

استادیار مهندسی مکانیک، دانشگاه یاسوج، یاسوج

یاسوج، صندوق پستی ۳۵۳-۷۵۹۱۴، moosaie@yu.ac.ir

چکیده- در این پژوهش، یک روش جدید برای ایجاد شرایط اولیه مورد نیاز در شبیه‌سازی دینامیک براونی جریان سوسپانسیون‌های رقیق پلیمری پیشنهاد شده است. برای این منظور از تابع توزیع احتمال تعادلی پلیمرها برای ایجاد یک جامعه آماری تعادلی از پلیمرها استفاده شده است. این روش کدنویسی شده و به کمک آن یک سوسپانسیون پلیمری در آغاز یک جریان برشی ساده شبیه‌سازی شده است. همچنین نتایج شبیه‌سازی در یک پیکره‌بندی مشابه جریانی با استفاده از روش مرسوم تولید شرایط اولیه ارائه شده‌اند. انطباق کامل نتایج نشان دهنده دقت بالای روش پیشنهادی برای تولید شرایط اولیه است. مزیت اصلی روش پیشنهادی حجم بسیار پایین محاسبات مورد نیاز آن است.

کلیدواژگان: شبیه‌سازی دینامیک براونی، سوسپانسیون رقیق پلیمر، شرایط اولیه، تابع توزیع احتمال تعادلی.

Generating initial conditions for the simulation of polymer suspensions using the equilibrium PDF

Amin Moosaie

Assistant Professor of Mechanical Engineering, Yasouj University, Yasouj, Iran
P.O.B 75914-353, Yasouj, Iran. moosaie@yu.ac.ir

Abstract- In this study, a new method for producing initial conditions that are required for the Brownian dynamics simulation of dilute polymer suspension flows is proposed. For this purpose, the equilibrium probability distribution function is employed to generate an equilibrium ensemble of polymers. This approach is programmed and by using it, a polymer suspension in the inception of a simple shear flow is simulated. Also, the results of simulations in a similar flow configuration based on the conventional approach of generating initial conditions are presented. The excellent agreement between the results demonstrates the high accuracy of the proposed method for generating initial conditions. The main advantage of the proposed method is its low computational cost.

Keywords: Brownian Dynamics Simulation, Dilute Polymer Suspension, Initial Conditions, Equilibrium Probability Distribution Function

۱- مقدمه

بودن انجام مطالعات آزمایشگاهی در این زمینه، شبیه‌سازی‌های عددی از اهمیت بالایی برخوردار هستند. در مسأله جریان پلیمر، فیزیک میدان جریان و فیزیک پلیمر با یکدیگر درگیر هستند. بدین معنا که هر یک بر دیگری تأثیر گذار است. بنابراین هر دو میدان باید هم‌زمان حل شوند. برای انجام

جریان سوسپانسیون‌ها یا محلول‌های پلیمری در کاربردهای متعددی پیش می‌آید. از آن جمله می‌توان به کاهش درگ آشفته، فرایند ساخت مواد کامپوزیت پلیمری و جریان پلیمرهای مذاب اشاره کرد. با توجه به پیچیدگی و هزینه‌بر

یک روش بسیار قوی برای انجام این کار، شبیه‌سازی دینامیک براونی (BD) می‌باشد. این روش مبتنی بر تئوری سینتیک پلیمرها است. در سال ۱۹۷۸، ارمک و مک کامون شبیه‌سازی BD برای یک زنجیره کوتاه پلیمر با اندرکنش‌های هیدرودینامیکی در حالت تعادل را ارائه کردند [۶]. فیکسمان اصول ریاضی BD برای شبیه‌سازی سوسپانسیون‌های پلیمری را توسعه داد [۷]. فان دن بروله ویژگی‌های رئولوژیکی مدل‌های مختلف برای محلول‌های پلیمری را با استفاده از BD مورد مطالعه و مقایسه قرار داد [۸].

در سال‌های اخیر، مدل‌های مختلف محلول‌های پلیمری برای مطالعه کاهش درگ آشفته بکار رفته‌اند. زاو و اخوان به کمک شبیه‌سازی مستقیم عددی (DNS) یک طرفه، مقایسه‌ای میان مدل سینتیک FENE و مدل تقریبی FENE-P در جریان کانال آشفته انجام دادند [۹]. در اینجا منظور از شبیه‌سازی یک طرفه این است که اثر میدان جریان بر روی پلیمرها در نظر گرفته شده، در حالی که از اثر پلیمرها بر میدان جریان صرف‌نظر شده است. بنابراین کاهش درگ در این نوع شبیه‌سازی قابل مشاهده نیست. تراپون با استفاده از مدل FENE به شبیه‌سازی کاهش درگ آشفته به کمک پلیمرها پرداخت [۱۰].

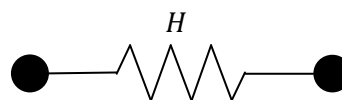
برای انجام شبیه‌سازی دینامیک براونی (BD) نیاز به داشتن شرایط اولیه است. در اغلب شبیه‌سازی‌هایی که توسط محققان مختلف ارائه شده‌اند، حالت تعادل به عنوان شرایط اولیه پلیمرها در نظر گرفته شده است. منظور از حالت تعادل، حالتی است که پلیمرها در یک سیال ساکن به سر می‌برند. روش مرسوم برای ایجاد شرایط اولیه تعادلی این است که از یک شرایط اولیه دلخواه (اغلب تصادفی) آغاز کرده و اجازه می‌دهند برای مدت زمان کافی پلیمرها در یک سیال ساکن شبیه‌سازی شوند تا به تعادل برسند. سپس پاسخ این شبیه‌سازی به عنوان شرایط اولیه شبیه‌سازی اصلی مورد استفاده قرار می‌گیرد. این کار مستلزم حجم محاسبات قابل توجهی صرفاً برای ایجاد شرایط اولیه است. نوآوری این مقاله نسبت به پژوهش‌های قبلی، ارائه روشی جدید برای ایجاد شرایط اولیه تعادلی پلیمرها است که حجم محاسبات بسیار کمتر و دقت بسیار بالایی دارد. برای این منظور از تابع توزیع احتمال تعادلی پلیمرها استفاده شده است. این تابع با یک رابطه تحلیلی معلوم است و بنابراین به آسانی و با حجم محاسبات کم قابل استفاده است.

شبیه‌سازی باید شرایط اولیه برای دینامیک پلیمرها معین شود. در این مقاله روشی جدید برای به دست آوردن شرایط اولیه پیشنهاد شده که دارای حجم محاسبات بسیار کمتری نسبت به روش مرسوم است.

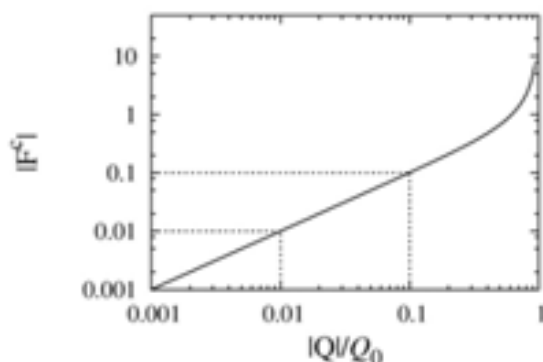
مدل‌های ریاضی متعددی توسط محققان مختلف برای دینامیک پلیمرها ارائه شده است. مهم‌ترین مدل‌ها شامل دو کره هستند که توسط فنری مطابق شکل ۱ به هم متصل شده‌اند. کره‌ها بیانگر جرم مولکول‌های تشکیل دهنده مونومرها هستند. ساده‌ترین حالت این مدل وقتی است که فنر خطی باشد. مشکل فنر خطی این است که هر چقدر نیرو افزایش یابد، فنر هم ازدیاد طول می‌دهد. بنابراین یک طول ماکزیمم برای پلیمر قابل تعریف نیست. در عمل یک پلیمر تا جایی کش می‌آید که همه مونومرها هم‌راستا شده و در این صورت پلیمر به طول ماکزیمم خود می‌رسد. بنابراین دقت مدل فنر خطی فقط برای حالت‌هایی است که انحراف طول پلیمر از حالت تعادل کوچک باشد.

برای رفع مشکل فوق، به جای فنر خطی یک فنر غیرخطی در نظر گرفته شده است. امروزه مدل‌های پلیمر دمبلی شکل با فنر غیرخطی نقش مهمی در شبیه‌سازی عددی جریان سوسپانسیون‌های پلیمری بازی می‌کنند. نخستین مدل غیرخطی توسط وارنر در سال ۱۹۷۲ پیشنهاد شد [۱]. وی همچنین حل‌های اغتشاشی و عددی مسأله را برای جریان برشی دائم ارائه نمود [۱]. آرمسترانگ حل اغتشاشی برای یک فنر غیرخطی دلخواه در یک جریان همگن دائم را به دست آورد [۲]. کریستیانسن و برد یک حل اغتشاشی برای یک جریان برشی نوسانی پیشنهاد دادند [۳]. فان روش عددی وارنر را بهبود بخشید [۴].

روش‌های اغتشاشی فقط برای جریان‌های ساده قابل توسعه هستند. برای جریان‌های پیچیده مانند جریان‌های آشفته روش‌های عددی دقیق مورد نیاز هستند. کاربرد اصلی چنین روش‌هایی در شبیه‌سازی و مطالعه کاهش درگ آشفته به کمک پلیمرها است [۵].



شکل ۱ یک مدل ساده از پلیمر شامل دو کره و یک فنر



شکل ۳ رفتار فنر غیرخطی در مدل FENE

هنگامی که طول پلیمر افزایش می‌یابد، رفتار غیرخطی فنر آغاز شده و نیروی لازم برای افزایش طول بیشتر می‌شود. رفتار خطی تا حدود $|Q|/Q_0 = 0.3$ قابل مشاهده است و از آن به بعد رفتار غیرخطی می‌شود. نیروی مورد نیاز برای آن که پلیمر به طول ماکزیمم خود برسد، بی‌نهایت خواهد بود. بنابراین این مدل هرگز اجازه نمی‌دهد که پلیمر به طول ماکزیمم خود برسد. به هر پلیمری که در سیال معلق است نیروهای زیر وارد می‌شوند؛ نیروی درگ سیال بر روی کره‌ها، نیروی فنر بین کره‌ها و نیروی حرکت براونی بر روی کره‌ها. دلیل حرکت براونی این است که پلیمر دائماً توسط مولکول‌های سیال حامل بمباران می‌شود. از آنجا که تعداد بسیار زیادی از این پلیمرها در سیال معلق هستند و همه آنها نیز دارای حرکت تصادفی براونی هستند، بهترین راه برای توصیف دینامیک آنها استفاده از یک تابع توزیع احتمال $\psi(Q; x, t)$ می‌باشد که نشان دهنده احتمال یافتن پلیمری در مکان x و در زمان t است که دارای بردار Q باشد. اگر پلیمر همه طول‌های ممکن از صفر تا Q_0 را اختیار کند و در همه جهات ممکن قرار گیرد، کل فضای حالت مسأله، فضای درون کره‌ای به شعاع Q_0 خواهد بود. تابع توزیع احتمال ψ به دلایل زیر تغییر می‌کند؛ اثر میدان جریان سیال حامل، نیروی فنر و حرکت براونی. ψ را می‌توان از حل معادله فوکر-پلانک (۳) به دست آورد [۱۱]:

$$\frac{D\psi}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial Q} \cdot \left(L \cdot Q - \frac{2}{\zeta} F^c \right) \psi + \frac{2k_B T}{\zeta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial Q^2} \quad (3)$$

که در آن $L = \nabla \circ U$ ، ζ ، k_B و T به ترتیب تانسور گرادیان سرعت، ضریب اصطکاک پلیمر، ثابت بولتزمن و دمای مطلق هستند. در ضمن \circ و \cdot به ترتیب نماد ضرب دیادیک و میدان سرعت سیال حامل می‌باشند. همچنین مشتق مادی

ادامه این مقاله به شرح زیر سازمان یافته است. در بخش بعد تئوری و معادلات حاکم بر دینامیک پلیمرها ارائه شده‌اند. معرفی روش‌های عددی مورد استفاده در بخش ۳ انجام گرفته است. در بخش ۴ روش ایجاد شرایط اولیه ارائه شده است. نتایج به دست آمده از روش جدید در بخش ۵ ارائه و با نتایج روش مرسوم مقایسه شده‌اند.

۲- تئوری و معادلات حاکم

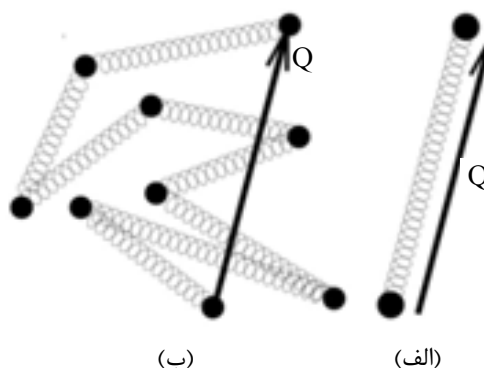
مطابق شکل ۲، یک پلیمر توسط بردار Q که دو سر آن را به هم وصل می‌کند توصیف می‌شود. فرض می‌شود که بین دو سر پلیمر یک فنر وجود دارد. چنانچه پلیمر با یک فنر خطی مدل شود، در این صورت نیروی فنر به شکل زیر نوشته می‌شود:

$$F^c = HQ \quad (1)$$

که در آن F^c و H به ترتیب نیروی فنر و ثابت فنر هستند. با توجه به مشکلاتی که مدل فنر خطی دارد و در مقدمه به آنها اشاره شد، معمولاً یک فنر غیرخطی در نظر گرفته می‌شود. وارنر رابطه غیرخطی (۲) را برای نیروی فنر پیشنهاد داد [۱]:

$$F^c = \frac{H}{1 - Q^2/Q_0^2} Q \quad (2)$$

که در آن Q_0 ماکزیمم طول پلیمر است. رفتار این مدل در شکل ۳ نشان داده شده است. همان طور که دیده می‌شود، وقتی طول پلیمر کم است و پلیمر در حالتی نزدیک به کلاف قرار دارد، مدل غیر خطی (۲) معادل مدل خطی (۱) است. این واقعیت را می‌توان با مشاهده خطوط خط چین افقی و عمودی در شکل ۳ تأیید کرد.



شکل ۲ یک پلیمر دمبلی (الف) که مدلی از یک پلیمر با زنجیره طولانی در حالت کلاف (ب) است.

$D\psi/Dt$ هم با رابطه (۴) تعریف می‌شود:

$$\frac{D\psi}{Dt} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathbf{U} \cdot \nabla\psi \quad (۴)$$

معادله فوکر-پلانک (۳) به عنوان حالت خاص معادله موج شرودینگر برای تابع احتمال ψ قابل تفهیم است. این معادله شامل تغییر محلی (عبارت اول در سمت راست معادله (۴))، جابجایی در فضای فیزیکی (عبارت دوم در سمت راست معادله (۴))، جابجایی در فضای حالت (عبارت اول در سمت راست معادله (۳)) و نفوذ در فضای حالت (عبارت دوم در سمت راست معادله (۳)) می‌باشد. عبارت جابجایی در فضای حالت خود شامل اثر جریان سیال (نیروی درگ بر روی کره‌ها) و نیز نیروی فنر بوده و عبارت نفوذ در فضای حالت نیز اثر حرکت براونی را در بر دارد. در ضمن در این مقاله ضریب نفوذ $2k_B T/\zeta$ ثابت فرض می‌گردد.

تابع توزیع احتمال $\psi(Q; \mathbf{x}, t)$ تابع γ کمیت است که عبارتند از ۳ مختصات بردار Q ، ۳ مختصات بردار \mathbf{x} و زمان t . بنابراین معادله (۳) هم یک معادله دیفرانسیل مشتق جزئی γ بعدی است. می‌توان این معادله را مانند هر معادله دیگر با استفاده از روش‌های عددی متعارف مانند تفاضل محدود گسسته و حل نمود. اما به دلیل بعد بالای آن، حجم محاسبات بسیار زیاد و در اغلب موارد کاربردی انجام حل ناممکن خواهد بود. مشکل دیگر غیرخطی بودن این معادله به دلیل وجود عبارت غیرخطی نیروی فنر F^c در آن است. بنابراین برای حل عددی معادله (۳) از تکنیک شبیه‌سازی دینامیک براونی (BD) استفاده می‌شود که در بخش بعدی معرفی شده است.

هنگامی که تابع توزیع احتمال $\psi(Q; \mathbf{x}, t)$ موجود باشد، می‌توان گشتاور آماری (امید ریاضی) آن را برای هر تابع دلخواه $B(Q)$ با استفاده از رابطه (۵) محاسبه کرد.

$$\langle B \rangle(\mathbf{x}, t) = \iiint B(Q) \psi(Q; \mathbf{x}, t) d^3Q \quad (۵)$$

که در آن انتگرال بر روی فضای حالت یعنی کره به شعاع Q_0 محاسبه می‌شود. بطور خاص دو گشتاور تعریف شده در روابط (۶) و (۷) مهم هستند:

$$\langle QQ \rangle(\mathbf{x}, t) = \iiint Q \circ Q \psi(Q; \mathbf{x}, t) d^3Q \quad (۶)$$

$$\langle QF^c \rangle(\mathbf{x}, t) = \iiint Q \circ F^c \psi(Q; \mathbf{x}, t) d^3Q \quad (۷)$$

وجود پلیمرها در سیال موجب ایجاد یک تنش غیرنیوتنی می‌شود [۱۱]. بنابراین تانسور تنش کلی سیال توسط رابطه

(۸) تعریف می‌شود:

$$\mathbf{S} = \mathbf{S}^N + \mathbf{S}^{NN} \quad (۸)$$

که در آن:

$$\mathbf{S}^N = 2\mu D, \quad D = (\mathbf{L} + \mathbf{L}^T)/2 \quad (۹)$$

تانسور تنش نیوتنی و \mathbf{S}^{NN} تانسور تنش غیر نیوتنی است که با رابطه کرامر داده می‌شود [۱۱]:

$$\mathbf{S}^{NN} = -n \langle QF^c \rangle + n \langle QF^c \rangle_{eq} \quad (۱۰)$$

که در آن n تعداد مولکول‌های پلیمر بر واحد حجم (معیاری از غلظت پلیمر) و $\langle QF^c \rangle_{eq}$ گشتاور در حالت تعادل است:

$$\langle QF^c \rangle_{eq} = \iiint Q \circ F^c \psi_{eq} d^3Q \quad (۱۱)$$

که در آن ψ_{eq} تابع توزیع احتمال در حالت تعادل می‌باشد. همان طور که از رابطه (۱۰) مشاهده می‌شود، تانسور تنش غیرنیوتنی در حالت تعادل صفر است و سوسپانسیون پلیمر مانند یک سیال نیوتنی رفتار می‌کند.

معمولاً ساده‌تر است که از فرم بی‌بعد معادلات حاکم استفاده شود. برای بی‌بعد کردن معادلات از واحد طول $(k_B T/H)^{1/2}$ و واحد زمان $\zeta/4H$ استفاده می‌شود. بدین ترتیب فرم بی‌بعد بردار Q ، زمان t و تانسور گرادیان سرعت \mathbf{L} به دست می‌آیند:

$$\hat{Q} = \frac{Q}{(k_B T/H)^{1/2}}, \quad \hat{t} = \frac{t}{\lambda_H}, \quad \hat{L} = \lambda_H L \quad (۱۲)$$

تانسور تنش غیرنیوتنی بدون بعد نیز به صورت زیر است:

$$\frac{\mathbf{S}^{NN}}{nk_B T} = - \left\langle \frac{\hat{Q}\hat{Q}}{1 - \hat{Q}^2/b} \right\rangle + E \quad (۱۳)$$

که در آن E تانسور یک‌به‌یکه بوده و b نیز با رابطه (۱۴) تعریف می‌شود:

$$b = \frac{HQ_0^2}{k_B T} \quad (۱۴)$$

بنابراین b معیاری از طول ماکزیمم پلیمر است. توجه شود که برای به دست آوردن رابطه (۱۳) از رابطه (۱۵) استفاده شد:

$$\langle QF^c \rangle_{eq} = k_B TE \quad (۱۵)$$

معادله (۱۵) از این اصل به دست می‌آید که تابع توزیع احتمال در حالت تعادل پلیمرها یک توزیع بولتزمن است [۱۱]. در نهایت چنانچه تابع توزیع احتمال به صورت زیر بی‌بعد شود:

$$\hat{\psi}(\hat{Q}; \hat{\mathbf{x}}, \hat{t}) = \psi(Q; \mathbf{x}, t) (k_B T/H)^{3/2}$$

معادله فوکر-پلانک (۳) به فرم بی‌بعد (۱۶) در می‌آید:

$$\frac{D\hat{\psi}}{Dt} = -\frac{\partial}{\partial \hat{Q}} \cdot \left(\hat{L} \cdot \hat{Q} - \frac{1}{2} \frac{1}{1 - \hat{Q}^2/b} \hat{Q} \right) \hat{\psi} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \hat{\psi}}{\partial \hat{Q}^2} \quad (16)$$

زیرا داریم:

$$\begin{aligned} \iiint \hat{\psi}(\hat{Q}) d^3 \hat{Q} &= \iiint \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\hat{Q} - \hat{Q}_i) d^3 \hat{Q} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \iiint \delta(\hat{Q} - \hat{Q}_i) d^3 \hat{Q} = \frac{1}{N} N = 1 \end{aligned} \quad (20)$$

در اثبات فوق از این واقعیت استفاده شده که انتگرال تابع دلتای دیراک برابر ۱ بوده و N بار جمع عدد ۱ برابر با N خواهد بود. با توجه به رابطه (۱۸) می‌توان گشتاورهای آماری مختلف تابع توزیع احتمال را به دست آورد.

$$\begin{aligned} \langle B \rangle &= \iiint B(\hat{Q}) \hat{\psi}(\hat{Q}) d^3 \hat{Q} = \\ &= \iiint B(\hat{Q}) \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\hat{Q} - \hat{Q}_i) d^3 \hat{Q} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \iiint B(\hat{Q}) \delta(\hat{Q} - \hat{Q}_i) d^3 \hat{Q} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N B(\hat{Q}_i) \end{aligned} \quad (21)$$

در اینجا از خاصیت تغییر متغیر تابع دلتای دیراک برای تابع تحت انتگرال استفاده شده است. معنای رابطه (۲۱) این است که چون اعضای جامعه مطابق تابع توزیع احتمال توزیع شده‌اند، برای محاسبه گشتاور به سادگی می‌توان میانگین حسابی نمونه‌ها را محاسبه نمود.

برای انتگرال‌گیری زمانی از معادله لانژواین (۱۷) می‌توان از روش صریح اوپلر بهره برد. اما این مشکل به وجود می‌آید که به دلیل صریح بودن روش ممکن است در بعضی گام‌های زمانی طول پلیمر از طول ماکزیمم بیشتر شود. برای رفع این مشکل دو راه جود دارد. راه اول این است که چنانچه طول پلیمر از طول مجاز بیشتر شد، مقدار \hat{Q}_i را به مقدار پیشین برگرداند. این روش وقتی دقت بالایی دارد که جمعیت جامعه آماری پلیمرها بسیار زیاد باشد. راه حل دیگر که در اینجا از آن استفاده شده توسط اوتینگر پیشنهاد شده است [۱۲]. بدین ترتیب که از یک روش ضمنی درجه دوم به جای روش صریح اوپلر برای انتگرال‌گیری زمانی معادله (۱۷) استفاده می‌گردد. این روش از دو مرحله تشکیل یافته است. مرحله اول مانند یک روش صریح اوپلر است:

$$\hat{Q}_i^{j+1} = \hat{Q}_i^j + \Delta W^j + \left(\hat{L}^j \cdot \hat{Q}_i^j - \frac{1}{2} \frac{1}{1 - \hat{Q}_i^j \cdot \hat{Q}_i^j / b} \hat{Q}_i^j \right) \Delta t^j \quad (22)$$

۳- روش عددی

از آنجا که حل مستقیم معادله فوکر-پلانک (۳) یا (۱۶) به دلیل بعد بالای آن مستلزم حجم محاسبات بسیار بالایی است، در اینجا از یک روش آماری پیشنهادی توسط اوتینگر [۱۲] استفاده شده است. اصول این روش در ادامه توضیح داده می‌شود. به جای تابع توزیع احتمال $\psi(Q; X, t)$ ، یک جامعه از پلیمرها در نظر گرفته می‌شود که طول و جهت‌گیری آنها مطابق $\psi(Q; X, t)$ باشد. سپس تکامل این جامعه در زمان تعقیب می‌شود. بنابراین در هر لحظه می‌توان تابع توزیع احتمال را از حالت جامعه پلیمرها به دست آورد. برای به دست آوردن قانونی جهت تکامل زمانی پلیمر i ام درون جامعه، معادله لانژواین (۱۷) که معادل با معادله فوکر-پلانک (۱۶) است در نظر گرفته می‌شود:

$$d\hat{Q}_i = \left(\hat{L} \cdot \hat{Q}_i - \frac{1}{2} \frac{1}{1 - \hat{Q}_i^2/b} \hat{Q}_i \right) dt + dW_i \quad (17)$$

که در آن dW_i افزایش یک فرایند آماری وینر سه بعدی است. برای شبیه‌سازی فرایند وینر از یک مولد اعداد تصادفی با توزیع گاوسی استفاده شده است [۱۲]. به دلیل کند بودن تابع استاندارد فرتن برای تولید اعداد تصادفی، یک مولد اعداد تصادفی در کد فرتن برنامه‌نویسی شده است.

بدین ترتیب با شروع کردن از یک شرط اولیه برای جامعه، یعنی مقادیر معین برای \hat{Q}_i ها در لحظه $t=0$ ، می‌توان با استفاده از معادله (۱۷) مقادیر بعدی \hat{Q}_i ها را در لحظات بعدی محاسبه نمود. در هر لحظه، با دانستن همه \hat{Q}_i ها در جامعه، تابع توزیع احتمال از رابطه (۱۸) به دست می‌آید:

$$\hat{\psi}(\hat{Q}) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \delta(\hat{Q} - \hat{Q}_i) \quad (18)$$

که در آن $\delta(\dots)$ تابع دلتای دیراک با آرگومان برداری است. این روش شرط نرمال بودن تابع توزیع احتمال یعنی رابطه (۱۹) را ارضا می‌کند:

$$\iiint \hat{\psi}(\hat{Q}) d^3 \hat{Q} = 1 \quad (19)$$

و غیردائم حرکت براونی، پلیمرها دائماً در نکاپو هستند و حالت دائمی وجود ندارد. اما کمیات میانگین مانند گشتاورها و تنش غیرنیوتنی به حالت دائم می‌رسند.

در شبیه‌سازی‌های دیگر محققان اشاره شده در فوق، برای به دست آوردن حالت تعادل ابتدا کد را با در نظر گرفتن $L=0$ (سیال ساکن) برای مدت زمان کافی اجرا می‌کنند تا شرایط تعادل ایجاد شود و یک جامعه تعادلی به دست آید، به عنوان مثال برای توضیحات به [۱۲] مراجعه شود. سپس این جامعه تعادلی به عنوان شرایط اولیه برای شبیه‌سازی اصلی مورد استفاده قرار می‌گیرد. مشکل اصلی این روش حجم محاسبات مورد نیاز صرفاً جهت ایجاد شرایط اولیه است.

در این مقاله، یک روش جدید مبتنی بر تابع توزیع احتمال تعادلی برای ایجاد یک جامعه تعادلی ارائه شده است. سپس این جامعه تعادلی می‌تواند به عنوان شرایط اولیه برای انجام شبیه‌سازی مورد استفاده قرار گیرد، بدون آن که نیاز به اجرای یک شبیه‌سازی مجزا برای تولید شرایط اولیه باشد.

معادله فوکر-پلانک (۱۶) در حالت تعادل دارای حلی به صورت رابطه (۲۴) است [۱۱]:

$$\hat{\psi}_{\text{eq}}(\hat{Q}) = N_{\text{eq}} \left(1 - \hat{Q}^2/b\right)^{b/2} \quad (24)$$

که در آن $\hat{Q}^2 < b$ می‌باشد. ضریب نرمال سازی N_{eq} به نحوی تعریف می‌شود که شرط (۱۹) توسط $\hat{\psi}_{\text{eq}}$ ارضا شود. با داشتن تابع توزیع احتمال تعادلی $\hat{\psi}_{\text{eq}}$ ، می‌توان گشتاور دوم بردار \hat{Q} را در حالت تعادل به دست آورد:

$$\langle \hat{Q}\hat{Q} \rangle_{\text{eq}} = \frac{b}{b+5} E \quad (25)$$

معادله (۲۵) این نتیجه را می‌دهد که به ازای مقادیر بزرگ b ، $\langle \hat{Q}\hat{Q} \rangle_{\text{eq}}$ تقریباً با تانسور یکه E برابر است.

همانطور که از رابطه (۲۴) ملاحظه می‌شود، تابع توزیع احتمال تعادلی تابع \hat{Q}^2 است نه \hat{Q} ، به عبارت دیگر فقط تابع طول \hat{Q} می‌باشد نه جهت آن. یعنی می‌توان گفت که برای هر طول مشخص، احتمال یافتن پلیمر در همه جهات یکسان است. از آنجا که $\hat{\psi}$ یک چگالی احتمال (احتمال بر واحد حجم در فضای حالت) است و چون در حالت تعادل فقط تابع طول (فاصله از مرکز کره) می‌باشد، می‌توان از ضرب آن در مساحت کره در هر شعاع $r = |\hat{Q}|$ به تابع چگالی احتمال شعاعی (چگالی احتمال بر واحد شعاع r) رسید:

که در آن Δt گام زمانی بی‌بعد و اندیس j شمارنده گام زمانی است. در اینجا طول \hat{Q}_i^{j+1} به دلیل استفاده از روش صریح لزوماً از طول مجاز کمتر نبوده و می‌تواند از آن بیشتر باشد. مرحله دوم یک انتگرال گیری ضمنی است:

$$\left(1 + \frac{1}{4} \frac{\Delta t}{1 - \hat{Q}_i^{j+1} \cdot \hat{Q}_i^{j+1}/b}\right) \hat{Q}_i^{j+1} = \hat{Q}_i^j + \Delta W^j + \frac{1}{2} (\hat{L}^{j+1} \cdot \hat{Q}_i^{j+1} + \hat{L}^j \cdot \hat{Q}_i^j) \Delta t - \frac{1}{4} \left(\frac{1}{1 - \hat{Q}_i^j \cdot \hat{Q}_i^j/b} \hat{Q}_i^j \right) \Delta t \quad (23)$$

معادله (۲۳) یک سیستم از سه معادله جبری غیرخطی برای سه مجهول مسئله (مختصات بردار \hat{Q}_i^{j+1}) است. برای حل آن دو راه پیش رو است. یکی این که آن را با استفاده از یک روش تکراری مانند نیوتن-رافسون حل نمود. روش دوم استفاده از حل تحلیلی است که اوتینگر پیشنهاد کرده است [۱۲]. در این مقاله برای کاهش حجم محاسبات از روش دوم استفاده می‌شود. طبق این روش، جهت \hat{Q}_i^{j+1} از عبارت سمت راست معادله (۲۳) و اندازه آن از حل تحلیلی یک معادله جبری درجه سوم که یک ریشه یکتا در بازه $[0, b^{1/2}]$ دارد، به دست می‌آید. روش عددی فوق به زبان فرترن برنامه‌نویسی شده است. این برنامه با یک کد فرترن دیگر که برای DNS و LES جریان آشفته بکار می‌رود ترکیب شده است که می‌تواند برای شبیه‌سازی و مطالعه کاهش درگ آشفته به کمک پلیمرها استفاده شود. همچنین این کد به کمک کتابخانه MPI برای پردازش موازی آماده شده است.

۴- روش ایجاد شرایط اولیه

برای حل عددی دینامیک پلیمرها نیاز به شرایط اولیه است. از آنجا که اطلاعاتی از شرایط پلیمرها در لحظه آغاز شبیه‌سازی در دست نیست، در اغلب شبیه‌سازی‌ها حالت تعادل به عنوان شرایط اولیه در نظر گرفته می‌شود، مانند [۱۰] و دیگر کارهای انجام شده در زمینه کاهش درگ. منظور از حالت تعادل وقتی است که پلیمرها در یک سیال ساکن معلق باشند. در این حالت اثر جریان بر پلیمرها صفر بوده و آنها فقط تحت تأثیر نیروی فنر و حرکت براونی هستند. بنابراین به‌طور میانگین یک حل دائم موجود است که در آن نیروی فنر و حرکت براونی در تعادل هستند. البته باید توجه شود که با توجه به ذات تصادفی

۲- به ازای هر بردار یکه تصادفی، یک عدد حقیقی تصادفی X_1 تولید می‌شود. بایستی X_1 در بازه $[0, b^{1/2}]$ باشد. حال چنانچه مقدار تابع احتمال به ازای X_1 کوچک‌تر از مقدار تابع احتمال تعادلی باشد، X_1 به عنوان طول \hat{Q}_i در نظر گرفته می‌شود. در غیر این صورت مرحله ۲ تکرار می‌شود تا این شرط برقرار شود.

۵- نتایج

روش ارائه شده در فوق برای ایجاد شرایط اولیه در کد فرتن برنامه‌نویسی و برای آغاز یک جریان برشی ساده اجرا شده است. در این قسمت نتایج حاصل و مقایسه آنها با نتایج به دست آمده از ایجاد شرایط اولیه به کمک روش مرسوم ارائه شده است.

منظور از آغاز یک جریان برشی ساده، حالت یک سیال در حال سکون است که ناگهان تحت جریان برشی ساده (جریان کوئت) قرار می‌گیرد. در این حالت، تنها مؤلفه غیر صفر تانسور گرادین سرعت $\partial U / \partial y$ است که با رابطه (۲۸) تعریف می‌شود:

$$\frac{\partial U}{\partial y} = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ \dot{\gamma} & t \geq 0 \end{cases} \quad (28)$$

که در آن $\dot{\gamma}$ یک نرخ برش ثابت است. نرخ برش را می‌توان به شکل $\lambda_H \dot{\gamma}$ بی‌بعد نمود.

هنگامی که سیال ساکن است، پلیمرها در حالت تعادل به سر می‌برند. بنابراین شرایط اولیه یک جامعه تعادلی است. با اعمال برش، انحراف از حالت تعادل آغاز می‌شود. در اینجا شبیه‌سازی‌ها برای سه نرخ برش متفاوت $\lambda_H \dot{\gamma} = 1, 10, 100$ انجام و گزارش شده‌اند. برای هر یک از نرخ‌های فوق نیز سه حالت $b = 20, 50, 100$ در نظر گرفته شده‌اند. برای انجام شبیه‌سازی‌ها از دو روش تولید شرایط اولیه استفاده شده است. یکی روش مرسوم که در آن یک شبیه‌سازی تعادلی برای مدت زمان کافی اجرا می‌شود تا یک جامعه تعادلی ایجاد شود. روش دوم، ایجاد شرایط اولیه با روش پیشنهادی در این مقاله است که به صورت یک کد فرتن برنامه‌نویسی شده است. در ادامه نتایج دو شبیه‌سازی ارائه و با یکدیگر مقایسه شده‌اند.

برای ارائه نتایج از نسبت افزایش لزجت $\eta_s - \eta$ استفاده شده که در آن η_s لزجت دینامیکی سیال حامل بدون حضور

$$f(r) = 4\pi r^2 \hat{\psi}_{eq}(\hat{Q}) \quad (26)$$

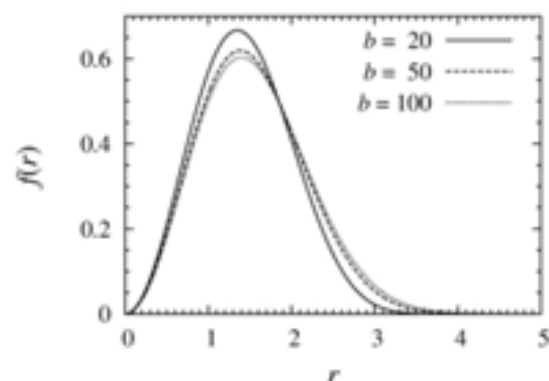
تابع $f(r)$ در شکل ۴ برای سه حالت $b = 20, 50, 100$ رسم شده است. هر چقدر مقادیر b افزایش یابند، قله تابع $f(r)$ کمی کاهش یافته و دامنه آن عریض‌تر می‌شود. یعنی برای b های بزرگ‌تر، طول پلیمرها کمتر حول مقدار خاصی تجمع کرده و بیشتر در مقادیر مختلف توزیع می‌شود.

حال که تابع توزیع احتمال تعادلی معلوم است، می‌توان از آن برای ایجاد یک جامعه تعادلی به عنوان شرایط اولیه استفاده نمود. الگوریتم پیشنهادی برای ایجاد یک جامعه تعادلی با N عضو به صورت زیر است.

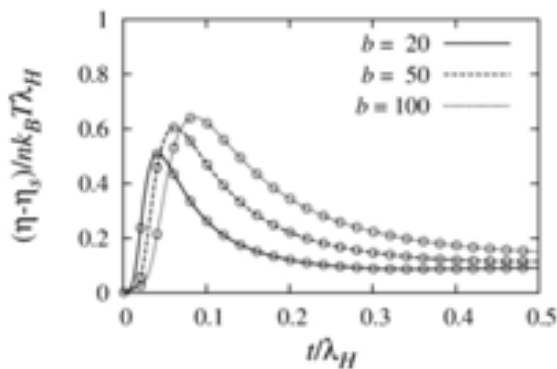
۱- ابتدا N بردار یکه تصادفی ساخته می‌شود. از آنجا که طول این بردارها واحد است، هر سه مؤلفه آنها را نمی‌توان آزادانه انتخاب نمود. بنابراین دو مؤلفه بطور تصادفی انتخاب شده و مؤلفه سوم از شرط یکه بودن بردار به دست می‌آید. به جای تولید تصادفی دو مؤلفه، روش دیگر تولید تصادفی N زاویه ϕ_i در بازه $[0, 2\pi]$ و N زاویه θ_i در بازه $[0, \pi]$ است. سپس بردارهای تصادفی از رابطه (۲۷) به دست می‌آیند:

$$n_i = (\sin \theta_i \cos \phi_i, \sin \theta_i \sin \phi_i, \cos \theta_i)^T \quad (27)$$

در این مقاله از روش اخیر برای تولید بردار یکه تصادفی استفاده شده است. بردار یکه تصادفی تولید شده n_i در واقع جهت بردار \hat{Q}_i است که به عنوان شرایط اولیه در نظر گرفته می‌شود. حال فقط تولید طول \hat{Q}_i باقی می‌ماند که در مرحله ۲ توضیح داده شده است.



شکل ۴ تابع توزیع احتمال شعاعی در حالت تعادل به ازای مقادیر مختلف $b = 20, 50, 100$



شکل ۷ نسبت افزایش لزجت برای $\lambda_H \dot{\gamma} = 100$ ، نتایج حاصل از روش مرسوم تولید شرایط اولیه هستند.

همچنین در همه این شکل‌ها، نمودارها از صفر شروع شده‌اند که نشانه این است که لزجت در ابتدای شبیه‌سازی افزایش نداشته است. به عبارت دیگر، تنش غیرنیوتنی در ابتدا صفر بوده که نشانه ایجاد صحیح یک جامعه تعادلی است.

نسبت افزایش لزجت طبق معادله (۲۹) بر اساس تنش برشی غیرنیوتنی تعریف می‌شود. علاوه بر تنش برشی، بررسی رفتار تنش نرمال نیز در رئولوژی اهمیت دارد. برای این منظور، کمیت ضریب اختلاف تنش نرمال معرفی شده است. در رئولوژی ضریب اختلاف تنش نرمال اول و دوم وجود دارند که با روابط زیر تعریف می‌شوند:

$$N_1 = -\frac{1}{nk_B T \lambda_H^2} \frac{S_{xx}^{NN} - S_{yy}^{NN}}{(\lambda_H \dot{\gamma})^2} \quad (30)$$

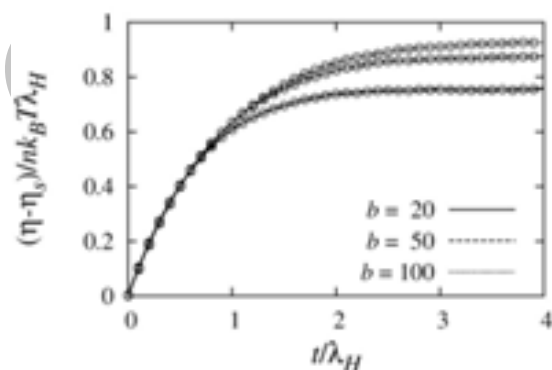
$$N_2 = -\frac{1}{nk_B T \lambda_H^2} \frac{S_{yy}^{NN} - S_{zz}^{NN}}{(\lambda_H \dot{\gamma})^2} \quad (31)$$

که در آن S_{xx}^{NN} ، S_{yy}^{NN} و S_{zz}^{NN} به ترتیب تنش‌های نرمال غیرنیوتنی در جهات x ، y و z هستند. در جریان برشی ساده N_2 بسیار کوچک و حدود صفر است [۱۳] و بنابراین در ادامه تنها N_1 بررسی شده است. شکل‌های ۸، ۹ و ۱۰ به ترتیب ضریب اختلاف تنش نرمال اول را برای حالات $\lambda_H \dot{\gamma} = 1$ ، $\lambda_H \dot{\gamma} = 10$ و $\lambda_H \dot{\gamma} = 100$ در آغاز جریان برشی نشان می‌دهند. تطابق نتایج به دست آمده از روش پیشنهادی با نتایج حاصل از روش مرسوم نشان می‌دهد که تنش‌های نرمال غیرنیوتنی نیز با دقت بالایی توسط روش پیشنهادی برای تولید شرایط اولیه پلیمرها محاسبه می‌شوند. در اینجا باید توجه کرد که پاسخها در حالت جریان برشی ساده پس از طی مدت زمان کافی به حالت دائم می‌رسند.

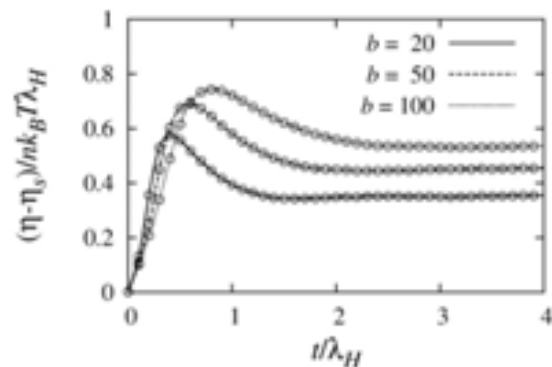
پلیمرها است. η نیز لزجت محلول پلیمری می‌باشد. بنابراین منظور از نسبت افزایش لزجت پلیمر $\eta - \eta_s$ ، میزان افزایش لزجت برشی سیال به دلیل افزودن پلیمرها است. $\eta - \eta_s$ به طریق زیر بی‌بعد شده تا نسبت افزایش لزجت بی‌بعد به دست آید:

$$\hat{(\eta - \eta_s)} = \frac{\eta - \eta_s}{nk_B T \lambda_H} = -\frac{1}{\lambda_H \dot{\gamma}} \frac{S_{xy}^{NN}}{nk_B T} \quad (29)$$

که در آن S_{xy}^{NN} تنش برشی غیرنیوتنی ناشی از پلیمر است. شکل‌های ۵، ۶ و ۷ به ترتیب نتایج را برای حالت‌های $\lambda_H \dot{\gamma} = 1, 10, 100$ و برای $b = 20, 50, 100$ نشان می‌دهند. نقاط نشان دهنده نتایج به دست آمده از روش مرسوم تولید شرایط اولیه هستند. تطابق بسیار عالی پاسخها با نتایج حاصل از روش مرسوم تولید شرایط اولیه نشان از کارکرد صحیح روش پیشنهادی در ایجاد یک جامعه تعادلی دارد.



شکل ۵ نسبت افزایش لزجت برای $\lambda_H \dot{\gamma} = 1$ ، نتایج حاصل از روش مرسوم تولید شرایط اولیه هستند.



شکل ۶ نسبت افزایش لزجت برای $\lambda_H \dot{\gamma} = 10$ ، نتایج حاصل از روش مرسوم تولید شرایط اولیه هستند.

[۱۴،۱۰]. بنابراین انطباق پاسخ‌ها به ویژه در ناحیه گذرا نشان از صحت و دقت شرایط اولیه تولید شده به کمک روش پیشنهادی دارد.

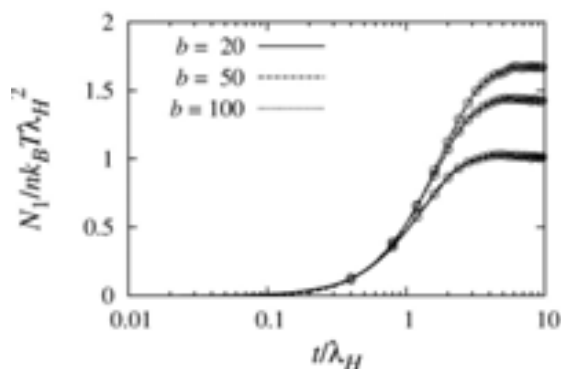
در این مقاله، هدف ارائه یک روش جدید برای تولید شرایط اولیه است که می‌تواند جایگزین مناسبی برای روش مرسوم باشد. برای این هدف نیازی به مقایسه با نتایج تجربی نبوده و نتایج صرفاً با روش مرسوم مقایسه شده‌اند. تطابق کامل نتایج نشان از این دارد که می‌توان از روش پیشنهادی به عنوان جایگزینی برای تولید شرایط اولیه در شبیه‌سازی‌های پلیمری استفاده کرد. همچنین بررسی تنها یک پیکره‌بندی جریانی برای اثبات صحت و دقت روش پیشنهادی کافی است. زیرا که جریان مورد بررسی در ناحیه گذرا بسیار وابسته به شرایط اولیه است و انطباق کامل با حل مرجع نشانه دقت بالای روش در ایجاد شرایط اولیه است.

۶- نتیجه‌گیری

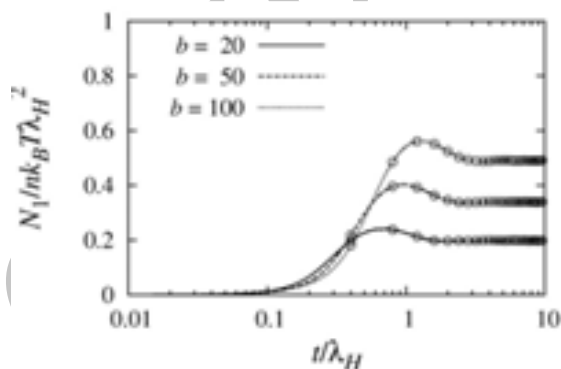
در این مقاله، یک رهیافت جدید برای تولید یک جامعه آماری تعادلی ارائه شده که می‌تواند برای ایجاد شرایط اولیه مورد نیاز برای شبیه‌سازی دینامیک براونی سوسپانسیون‌های رقیق پلیمری بکار رود. این روش مبتنی بر استفاده از تابع توزیع احتمال تعادلی است. نتایج این روش در آغاز یک جریان برشی ساده ارائه و با نتایج به دست آمده از روش مرسوم تولید شرایط اولیه مقایسه شده‌اند و انطباق بسیار خوبی میان پاسخ‌ها مشاهده شد. بکارگیری رهیافت جدید موجب افزایش قابل ملاحظه سرعت تولید شرایط اولیه شده است.

۷- مراجع

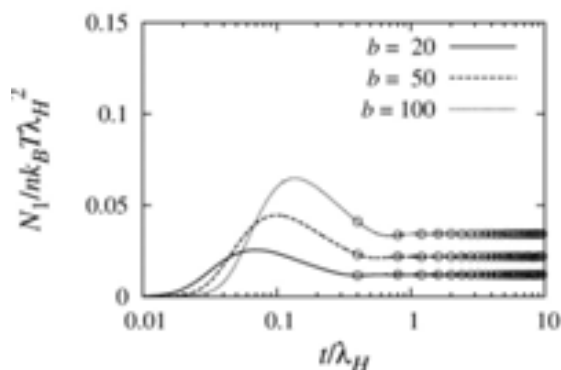
- [1] Warner H.R., "Kinetic Theory and Rheology of Dilute Suspensions of Finitely Extendible Dumbbells", *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, Vol. 11, 1972, pp. 379-387.
- [2] Armsrtong R.C., "Kinetic Theory and Rheology of Dilute Solutions of Flexible Macromolecules. I. Steady State Behavior", *J. Chem. Phys.*, Vol. 60, 1974, pp. 724-733.
- [3] Christiansen R.L., Bird R.B., "Dilute Solution Rheology: Experimental Results and Finitely Extensible Nonlinear Elastic Dumbbell Theory", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 3, 1978, pp. 161-177.
- [4] Fan X.J., "Viscosity, First Normal-Stress



شکل ۸ ضرب اختلاف تنش نرمال اول برای $\lambda_H \dot{\gamma} = 1$ ، نتایج حاصل از روش مرسوم تولید شرایط اولیه هستند.



شکل ۹ ضرب اختلاف تنش نرمال اول برای $\lambda_H \dot{\gamma} = 10$ ، نتایج حاصل از روش مرسوم تولید شرایط اولیه هستند.



شکل ۱۰ ضرب اختلاف تنش نرمال اول برای $\lambda_H \dot{\gamma} = 100$ ، نتایج حاصل از روش مرسوم تولید شرایط اولیه هستند.

مقادیر حالت دائم تابع شرایط اولیه نبوده و از هر شرایط اولیه‌ای که شبیه‌سازی آغاز شود، به مقادیر دائم یکسانی خواهد رسید. اما رفتار گذرای که پیش از رسیدن به حالت دائم مشاهده می‌شود، به شدت تابع شرایط اولیه است و با تغییر شرایط اولیه تغییرات چشمگیری را از خود نشان می‌دهد

- [9] Zhou Q., Akhavan R., "A Comparison of FENE and FENE-P Dumbbell and Chain Models in Turbulent Flow", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 109, 2003, pp. 115-155.
- [10] Terrapon V.E., *Lagrangian Simulations of Turbulent Drag Reduction by a Dilute Solution of Polymers in a Channel Flow*, PhD Thesis, Stanford University, 2005.
- [11] Bird R.B., Curtiss C.F., Armstrong R.C., Hassager O., *Dynamics of Polymer Liquids. Vol. 2, Kinetic Theory*, New York, Wiley, 1987.
- [12] Öttinger H.C., *Stochastic Processes in Polymeric Fluids*, Berlin, Springer, 1996.
- [13] Bird R.B., "Teaching with FENE Dumbbells", *Rheol. Bull.*, Vol. 76, 2007, pp. 10-12.
- [14] Herrchen M., Öttinger H.C., "A Detailed Comparison of Various FENE Dumbbell Models", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 68, 1997, pp. 17-42.
- Coefficient, and Molecular Stretching in Dilute Polymer Solutions", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 17, 1985, pp. 125-144.
- [5] White C.M., Mungal M.G., "Mechanics and Prediction of Turbulent Drag Reduction with Polymer Additives", *Annu. Rev. Fluid Mech.*, Vol. 40, 2008, pp. 235-256.
- [6] Ermak, D.L., McCammon, J.A., "Brownian Dynamics with Hydrodynamic Interactions", *J. Chem. Phys.*, Vol. 69, 1978, pp. 1352-1360.
- [7] Fixman M., "Simulation of Polymer Dynamics. I. General Theory", *J. Chem. Phys.*, Vol. 69, 1978, pp. 1527-1545.
- [8] Van den Brule B.H.A.A., "Brownian Dynamics Simulation of Finitely Extensible Bead-Spring Chains", *J. Non-Newtonian Fluid Mech.*, Vol. 47, 1993, pp. 357-378.

Archive of SID