

VÉGESELEM MÓDSZER POLIMER-FOLYADÉKOK DETERMINISZTIKUS MODELLJÉHEZ

DAVID KNEZEVIC, SÜLI ENDRE¹

E cikkben megvizsgálunk egy oldott polimer-folyadékok dinamikáját leíró, többskálájú, csatolt Navier–Stokes (NS) és Fokker–Planck (FP) modell megoldására javasolt végeelem alapú módszert. A szakirodalomban nem sokan foglalkoztak a probléma mienkhez hasonló, determinisztikus megközelítésével, mivel ez hihetetlen számítási kihívást jelent amiatt, hogy a Fokker–Planck-egyenlet analitikus megoldása egy nagyon sok változótól függő leképezés is lehet. Például, háromdimenziós áramlás olyan szimulációja esetén, amely polimer molekulák súlyzó modelljén alapul, egy olyan csatolt NS–FP-rendszert kell megoldanunk, ahol a Fokker–Planck-egyenletet hatdimenziós tartományon állítjuk fel.

A cikkben először áttekintjük az NS–FP-modell fizikai és matematikai alapjait, majd részletesen kidolgozzuk az általunk javasolt determinisztikus végeelem alapú megoldási módszert. Bemutatunk néhány parallel számítással elért numerikus eredményt azért, hogy módszerünk hatékonyságát demonstráljuk.

1. Bevezetés

A polimer-folyadékok dinamikája fejlett kutatási terület, melyet több mint hetven éve tanulmányoznak. Az érdeklődést részben e folyadékok ipari és kereskedelmi alkalmazásai sarkallják, de emellett a polimer-folyadékok dinamikája egyre nagyobb figyelmet kap alkalmazott matematikával és numerikus analízissel foglalkozóktól e terület adta különleges kihívásoknak köszönhetően. Ugyanis a polimer-folyadékok dinamikája alapvetően „többskálájú”, hiszen ahhoz, hogy hűen modellezzük e folyadékok produkálta bonyolult rheológiai tulajdonságokat, kombinálnunk kell a mikroszkopikus polimer molekulák dinamikáját a folyadék egészének áramlásával. Cikkünk elsődleges célja az, hogy megpróbálja kiterjeszteni a többskálájú modellek matematikai és számítási módszereit polimer-folyadékok esetében. A polimer-folyadékok természetes belső bonyolultsága, valamint a kapcsolódó matematikai modellek többségének ennek eredményeképpen analitikusan nehezen kezelhető volta miatt a numerikus megközelítések egyre nagyobb szerepet játszanak.

¹A szerkesztők köszönetüket fejezik ki Szilárd Ágnesnek (Rényi Alfréd Matematikai Kutatóintézet) és Gáspár Csabának (Széchenyi István Egyetem) az eredetileg angol nyelvű kézirat gondos, szakértő fordításáért.

Cikkünkben végesem módszert dolgozunk ki oldott polimer-folyadékok numerikus modelljeire. A módszer tárgyalását azonban a 2. részre hagyjuk, mivel először rövid áttekintést adunk a polimer-folyadékok dinamikáját leíró elméletről. Determinisztikus megközelítési módszerünkben eredő számításainkat a 3. részben, míg következtetéseinket és további terveinket a 4. részben tárgyaljuk.

1.1. Polimer-folyadékok

A polimer molekulák – melyekre gyakran makromolekulaként hivatkoznak – alap-szerkezeti egységek, ún. monomerek, ismétlődő láncából állnak. E makromolekulák tulajdonságai okozzák, hogy a polimer-folyadékok nagyon eltérően viselkednek a newtoni folyadékokhoz képest. Viszko-elasztikus folyadékoknak hívják ezeket, evvel is kiemelve, hogy mind viszkózus, mind elasztikus tulajdonságokkal rendelkeznek. (Elasztikusak olyan értelemben, hogy ezek a folyadékok „emlékeznek” korábbi deformációikra.) Ez a viszko-elaszticitás eredményez olyan egzotikus jelenségeket, mint a nyíróvékonyodás (shear-thinning), a rúdramászás (rod-climbing) és a csőnélküli szifon (tubeless syphon).

E cikkben oldott polimer-folyadékokkal foglalkozunk, azaz feltételezzük, hogy a polimer molekulák egy newtoni közegben úsznak olyan alacsony koncentrációban, hogy az egyes polimer molekulákról feltehető, hogy nem érintkeznek egymással. Az ilyen folyadékok esetében a megmaradási egyenletek ugyanazok, mint a newtoni esetben, azaz a tömegmegmaradásra azt kapjuk, hogy

$$\nabla \cdot \underline{u} = 0, \quad (1)$$

a momentum megmaradásra pedig

$$\rho \left(\frac{\partial \underline{u}}{\partial t} + \underline{u} \cdot \nabla \underline{u} \right) = \nabla \cdot \underline{\underline{\sigma}}. \quad (2)$$

A rugalmassági alaptörvény

$$\underline{\underline{\sigma}} = -p \underline{I} + \eta_s (\nabla \underline{u} + (\nabla \underline{u})^T) + \underline{\underline{\tau}} \quad (3)$$

a folyadékon belüli feszültségi és deformációs tenzorok közötti összefüggés newtoni feltételeiből adódik egy plusz tag hozzáadásával. Ez a $\underline{\underline{\tau}}$ tag, a polimer extra-feszültsége, mely a polimer molekulák jelenlétének köszönhető.

Tegyük fel, hogy a folyadék az Ω fizikai tartományon belül marad, melyről feltesszük, hogy $\mathbb{R}^d$ egy korlátos, nyílt részhalmaza, $d = 2, 3$. Tegyük fel továbbá, hogy adottak valamilyen megfelelő peremfeltételek $\partial\Omega$ -án; például tapadó fal feltételt teszünk fel vagy periodikus peremfeltételt. Akkor az (1–3) egyenletek a Navier–Stokes-egyenletekre vezetnek, ahol $\underline{\underline{\tau}}$ a forrás tag, s így az a feladat, hogy találjunk $\underline{u} : (\underline{x}, t) \in \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow \underline{u}(\underline{x}, t) \in \mathbb{R}^d$ és $p : (\underline{x}, t) \in \Omega \times \mathbb{R} \rightarrow p(\underline{x}, t) \in \mathbb{R}$

leképezéseket, amikre

$$\rho \left(\frac{\partial u}{\partial t} + \tilde{u} \cdot \tilde{\nabla} u \right) - \eta_s \Delta \tilde{u} + \tilde{\nabla} p = \tilde{\nabla} \cdot \tilde{\tau} \quad \Omega \times (0, T] - \text{ben.} \quad (4)$$

$$\tilde{\nabla} \cdot \tilde{u} = 0 \quad \Omega \times (0, T] - \text{ben,} \quad (5)$$

$$\tilde{u}(\tilde{x}, 0) = \tilde{u}_0(\tilde{x}) \quad \forall \tilde{x} \in \Omega.$$

A fenti egyenletben η_s a közeg viszkozitási együtthatója.

Ahhoz, hogy megoldjuk ezt az egyenletrendszert, meg kell határoznunk $\tilde{u}$ -t. A hagyományos megközelítésmód egy olyan alaptörvény (általában algebrai vagy differenciálegyenlet) felállítása, mely csak makroszkopikus mennyiségektől függ, s amely összefüggést ad $\tilde{u}$ és a folyadék deformációs előtörténete között [?]. Egy ilyen alapegyenlet vagy alaptörvény alapulhat tisztán makroszkopikus megfontolásokon is, de manapság gyakoribb, hogy kinetikus elméletből vezetik le, mivel a kinetikus elméleten alapuló elemzés nagyobb modellezési szabadságot biztosít és bizonyítottan valósághűbb modellekhez vezet. Azonban – a legegyszerűbb eseteket kivéve, mint amilyen a Hooke-féle súlyzó modell (ld. az 1.2. részt) – ahhoz, hogy kinetikus elméleten alapuló modellből tisztán makroszkopikus alaptörvényt állítsunk fel, a modell közelítő lezártjával kell dolgoznunk, ez pedig az alapmodell pontosságát rontja [?].

Az, hogy hagyományosan a kutatások az alapmodell közelítő lezártjára fókuszáltak, érthető, mivel az olyan modellek megoldásainak kiszámítása, melyek csak makroszkopikus változóktól függenek, sokkal kevesebb munkát igényel, s számos esetben (főleg egyszerű áramlások esetén) e makroszkopikus modellek analitikusan is megoldhatók. Azonban a rendelkezésre álló számítási lehetőségek robbanásszerű megnövekedése miatt lehetővé és kívánatosá vált, hogy közvetlenül a pontosabb, többskálájú, a kinetikus elméletet a mikroszkopikus szinttel összekötő „mikro-makro” modellek alapján számítsunk. E cikk középpontjában a többskálájú modellek állnak; ezért a továbbiakban nem foglalkozunk tisztán makroszkopikus modellekkel. Le szeretnénk szögezni azonban, hogy a makroszkopikus megközelítésmód továbbra is alapvető része a folyadékok elméleti és numerikus rheológiai kutatásának, s a kapcsolódó számítások hatékonysága, illetve a makroszkopikus modellek matematikai kezelhetősége biztosítja, hogy e modellek a belátható jövőben továbbra is fontos szerepet játszanak.

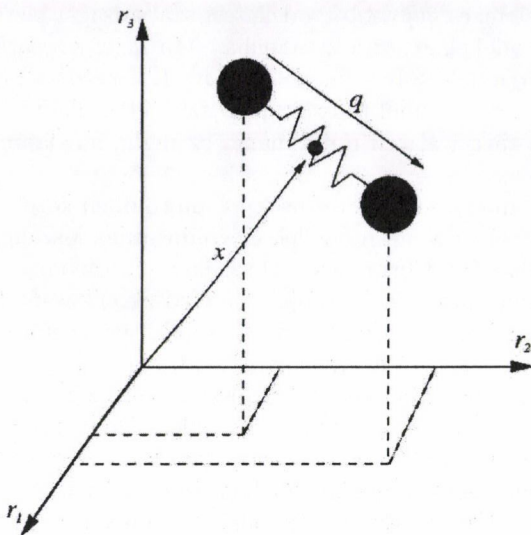
1.2. Polimer-láncok modelljei

Ahhoz, hogy kinetikus elméleten alapuló egyenleteket állíthassunk fel a polimer-folyadékok viselkedésének leírására, arra van szükség, hogy az egyes polimer molekulákat egyszerű modell írja le. Az elmúlt ötven évben polimerek számos „durva-szemcsés” mechanikai modelljét vezették be (a legfontosabb példák tárgyalását lásd Bird és munkatársai [?] 10. fejezetében). A két leginkább használatos az ún. *Kramer-lánc* [?], illetve a *Rouse-Zimm-lánc* [?, ?] modell. Mindkét modell

golyók láncaként ábrázolja a polimert. A Kramer-lánc esetében a golyókat merev, tömeggel nem rendelkező rudak kötik össze, míg a Rouse–Zimm-lánc esetében (F kifejtett erővel rendelkező) rugókat használnak a golyók összekapcsolására.

Ezen modellek numerikus szimulációja azonban nagyon drága, mivel általában nagy szabadságfokkal rendelkeznek (körülbelül tíztől több százig). Ennek eredményeképpen a legnagyobb figyelmet a polimer modellek hierarchiájának legalján álló, legegyszerűbb ún. *súlyzó* modell kapta. Ez a modell csak két golyóból áll, melyeket egy rugó köt össze. A súlyzót teljesen meghatározza a tömegközéppont $\underline{x}$ helye, valamint a végpontjai közötti $\underline{q}$ vektor. Az $\underline{x}$ lehetséges értékeit (azaz értelmezési tartományát) *fizikai térnek* nevezzük (jele Ω), míg $\underline{q}$ -ét *konfigurációs térnek* (jele D).

Az 1. ábrán látható egy súlyzó sematikus képe, s az $\underline{x}$ és $\underline{q}$ változókat is bejeleltük.



1. ábra. A súlyzó modell két golyóból és egy összekötő rugóból áll. A súlyzó állapotát meghatározza a tömegközéppont $\underline{x}$ helyzete és a végpontokat összekötő $\underline{q}$ vektor.

A súlyzó modell egyszerűsége ellenére is nagyon hasznos a polimer-folyadékok viselkedésének leírásakor. Ez azért van, mert a súlyzót nyújthatja és irányíthatja az áramlás, s e két tulajdonság sok esetben nagyjából meghatározza a polimer-folyadék rheológiai tulajdonságait.

A súlyzó modell függ az összekötő rugót leíró erőtvénnytől. A két legáltalánosabban használatos a „Hooke-rugó”, ahol

$$\hat{F}(\underline{q}) = \underline{q},$$

illetve a *végesen nyújtható, nemlineáris, elasztikus* (Finitely Extensible Nonlinear Elastic (FENE)) rugó [?], melyre

$$\hat{F}(\underline{q}) = \frac{\underline{q}}{1 - |\underline{q}|^2/b}. \quad (6)$$

Fentebb mindkét egyenlet dimenzió nélküli formáját írtuk fel.

Hooke-rugók esetében $\underline{q} \in \mathbb{R}^d$, míg FENE-rugóknál $\underline{q} \in B(0, \sqrt{b})$, ahol $B(0, s)$ a d -dimenziós, origó középpontú, s sugarú gömböt jelöli, b pedig egy dimenzió nélküli paraméter, melynek értékészlete általában $[10, 1000]$ (ld. [?]), s amely a rugó maximális megnyúlását határozza meg.

A Hooke-rugók esetét széleskörűen és alaposan tanulmányozták, mivel analitikusan megoldható egyenletekhez vezet. Kiemeljük például, hogy a jólismert Oldroyd-B-modell, mely oldott polimer-folyadékok leírására szolgál, s melyet eredetileg kontinuum-mechanikai megfontolások alapján állítottak fel [?], ekvivalens a Hooke-féle mikro-makro súlyzó modellel [?]. Mivel azonban a Hooke-féle lineáris törvénynek elegettevő rugók a valóságban nem nyújthatók a végtelenségig, ez a modell bizonyos esetekben, mint amilyen az erősen nyújtó hatású áramlás, nem használható.

Ilyen esetben használhatjuk a FENE-modellt, melyben korlátozott a nyújthatóság. A FENE-modell valósághűbb, mint a Hooke-modell, de a (nemlineáris) FENE-modell használatakor fel kell adnunk minden reményt arra, hogy zárt alakú analitikus eredményt kapjunk nem-egyensúlyi áramlás esetében. Így FENE-rugóknál numerikus megközelítésre van szükség.

Célunk egy hatékony végeelem módszeren alapuló numerikus eljárás kidolgozása és elemzése, melynek segítségével megoldható az oldott polimer-folyadékok olyan többskalájú modelljéből adódó egyenletrendszer, ahol a polimereket FENE-rugóval összekötött súlyzóknak képzeljük. Ez jelentős kihívást jelent még úgy is, hogy a súlyzó modell a polimer molekuláknak egy elég durva megközelítése. Például, háromdimenziós áramlás esetén olyan egyenletrendszert kell megoldanunk, ahol a Navier–Stokes és Fokker–Planck-egyenletek csatolt rendszert alkotnak, s ahol a Fokker–Planck-egyenlet hatdimenziós, mivel az egyes súlyzók szabadságfoka éppen hat: 3 az $\underline{x}$ és 3 a $\underline{q}$ változóból adódóan. Amennyiben az általunk kidolgozott módszer sikeresen alkalmazható a súlyzó modellből következő egyenletekre, akkor további kutatás célja lehet a módszer kiterjesztése golyó-rugó típusú láncok esetére.

1.3. A Fokker–Planck-egyenlet

A polimermolekula-konfiguráció ψ valószínűségi sűrűségfüggvényének evolúcióját Fokker–Planck-egyenlet írja le. Az egyenlet részletesen kidolgozott levezetése

megtalálható Lozinski [?] Ph.D. dolgozatában és Barrett & Süli [?] cikkében. Most csak a végeredményt idézzünk. Tehát keressük azt a

$$\psi : (\underline{x}, \underline{q}, t) \in \Omega \times D \times (0, T] \rightarrow \psi(\underline{x}, \underline{q}, t) \in \mathbb{R}_{\geq 0}$$

leképezést, amire

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} + (\underline{u} \cdot \nabla_{\underline{x}}) \psi + \nabla_{\underline{q}} \cdot \left(\left(\underline{\kappa} \underline{q} - \frac{1}{2\lambda} F(\underline{q}) \right) \psi \right) = \frac{1}{2\lambda} \Delta_{\underline{q}} \psi. \quad (7)$$

A fenti egyenletben F jelöli a súlyzó összekötő rugója erejét, λ pedig a polimerre jellemző relaxációs időt. Minden $(\underline{x}, t) \in \Omega \times [0, T]$ pont esetén $\psi(\underline{x}, \cdot, t)$ egy valószínűségi sűrűségfüggvény, ezért kielégíti az alábbi normalizációs feltételt:

$$\int_D \psi(\underline{x}, \underline{q}, t) d\underline{q} = 1.$$

A (7) egyenletet kiegészítjük a $\psi(\underline{x}, \underline{q}, 0) = \psi_0(\underline{x}, \underline{q})$ kezdeti feltétellel és megfelelő peremfeltételekkel. A (7) egyenlet viselkedése nagyon különböző a fizikai és a konfigurációs térben, s a peremfeltételeknek ezt tükrözniük kell. Ugyanis a konfigurációs térben a (7) egyenlet parabolikus és általában homogén Dirichlet-peremfeltételt adunk meg $\Omega \times \partial D$ -n, mivel a súlyzó nem éri el a maximális lehetséges hosszát.

A fizikai térben azonban hiperbolikus egyenletet kapunk, s ezért, ha $\partial\Omega^-$ jelöli a perem azon részét, ahol a folyadék beáramlik, akkor csak $\partial\Omega^- \times D$ -n adunk meg peremfeltételt. Ahhoz azonban, hogy csak a perem azon részén adjunk peremfeltételt, ahol a folyadék beáramlik, ismernünk kell ψ -t a peremen, folyásiránnyal szemben. Egy lehetséges megoldás, hogy periodikus határral dolgozunk. Egy másik megoldás, hogy teljesen kifejlődött áramlást tételezünk fel a folyásiránnyal szemben azért, hogy az áramlás valószínűségi sűrűségfüggvényét meg tudjuk határozni.

1.4. A polimer extra-feszültségi tenzora

A (7) egyenlet bevezetésének célja az volt, hogy segítségével ki tudjuk számítani a $\underline{\tau}(\underline{x}, t)$ extra-feszültségi tenzort. Biller és Petruccione [?] kidolgozták azt a képletet (az ún. *Kramers-képlet* általánosítását), mellyel $\underline{\tau}$ kiszámítható ψ -ből inhomogén sebességmező esetén:

$$\underline{\tau}(\underline{x}, t) = n_p k T \left(-\underline{I} + \int_D \underline{q} \otimes F(\underline{q}) \psi(\underline{x}, \underline{q}, t) d\underline{q} \right), \quad (8)$$

ahol n_p az ún. polimerszám sűrűség, k a Boltzmann-állandó, és T az abszolút hőmérséklet. A (8) egyenletből és a (6) kifejezésből látható, hogy $\underline{\tau}$ szimmetrikus.

Célunk szempontjából hasznos a (8) képletet kifejezni az ún. *polimer viszkozitás* segítségével, melynek jele η_p , s melyet a newtoni folyadékok viszkozitásához hasonlóan definiálnak. FENE súlyzó modell esetében, $\dot{\gamma}$ nyírósebességű nyíróáramlást feltételezve, megmutatható, hogy a nyírásirányú feszültséget jól közelíti

$$\tau_{xy} \approx \dot{\gamma} \lambda n_p kT \left(\frac{b+d+2}{b} \right);$$

(ld. [?]). Így a polimer viszkozitás:

$$\eta_p := \lambda n_p kT \left(\frac{b+d+2}{b} \right).$$

A fentiek felhasználásával a (8) képlet a következőt adja FENE súlyzókra:

$$\underline{\tau}(\underline{x}, t) = \frac{\eta_p}{\lambda} \left(\frac{b+d+2}{b} \right) \left(-\underline{I} + \int_D \underline{q} \otimes \underline{F}(\underline{q}) \psi(\underline{x}, \underline{q}, t) d\underline{q} \right).$$

A csatolt NS-FP-egyenletrendszer időben globális, gyenge megoldásai létezésére vonatkozó analitikus eredményeket illetően lásd Barrett, Schwab & Süli [?] és Barrett & Süli [?] cikkeit, melyekben a vonatkozó elmélet fejlődésének részletes leírása is megtalálható.

Most, hogy áttekintettük a csatolt NS-FP-rendszert és meghatároztuk $\underline{\tau}$ -t, készen állunk e mikro-makro rendszer numerikus megoldásának tárgyalására.

2. Polimer-folyadékok dinamikájának numerikus megközelítései

A numerikus rheológia hőskora kb. 1970-re tehető. A korai kutatások szükségyszerűen kizárólag az 1. részben tárgyalt makroszkopikus megközelítéssel dolgoztak, mivel ez a számítások szempontjából sokkal kevésbé idő- és eszközigényes, mint a mikro-makro módszerek. A makroszkopikus számítások tipikusan a folyadékok dinamikájának szokásos számítási eszközeit használják, mint amilyenek a végeselem, végestérfogat és spektrál módszerek. Az ilyen irányú kutatások jelentős mértékűek, s a terület még mindig aktívan fejlődik; lásd Keunings [?] informatív összefoglalóját.

Alternatív megközelítésként, a kora 1990-es évektől megnőtt a többskálájú modellek (mint amilyen az 1. részben tárgyalt csatolt NS- és FP-egyenletrendszer) közvetlen vizsgálatának népszerűsége. A kulcsötletet e téren Öttinger és Laso adták 1992-ben (ld. [?]), amikor azt javasolták, hogy használjuk ki a (7) Fokker-Planck-egyenlet ekvivalenciáját a

$$\begin{aligned} d\underset{\sim}{q}(\underset{\sim}{x}, t) + \underset{\sim}{u}(\underset{\sim}{x}, t) \cdot \nabla_{\underset{\sim}{x}} \underset{\sim}{q}(\underset{\sim}{x}, t) dt = \\ = \left(\underset{\sim}{\kappa}(\underset{\sim}{x}, t) \underset{\sim}{q}(\underset{\sim}{x}, t) - \frac{1}{2\lambda} F(\underset{\sim}{q}(\underset{\sim}{x}, t)) \right) dt + \sqrt{\frac{1}{\lambda}} dW(\underset{\sim}{x}, t) \quad (9) \end{aligned}$$

Itô sztochasztikus differenciálegyenlettel, majd oldjuk meg a (9) egyenletet Monte-Carlo típusú módszerrel. Ez az ötlet számos módszert eredményezett, melyeket összefoglalóan *sztochasztikus módszereknek* nevezünk, s melyeket teljesen kidolgoztak és polimer-folyadékok széles skálájának modellezésére használtak (ld. például [?, ?, ?]). A sztochasztikus megközelítésnek van azonban egy igen gyenge pontja: a fellépő sztochasztikus hiba csak lassan csökken (tipikusan $\mathcal{O}(N^{-1/2})$ nagyságrendben, ha $N \rightarrow \infty$, ahol N a módszerben használt pontok száma).

Ugyan kidolgoztak variáció csökkentő eljárásokat azért, hogy ezt a hibát javítsák, de a sztochasztikus hiba jelenléte még eme eljárások alkalmazása után is hátrányt jelent, s elkerülése fontos motivációs tényező a determinisztikus módszerekre való átállásra. Másrészt azonban a sztochasztikus megközelítés egy jelentős előnye, hogy jól illeszkedik a polimer-modell szabadságfokaihoz – például többszáz szabadságfokú modellekkel is végeztek számításokat (ld. [?]).

Az e cikkben propagált többskálájú megközelítésként szeretnénk *determinisztikusan* meghatározni mind az $\underline{u}(\underline{x}, t)$ sebességmezőt, mind a $\psi(\underline{x}, \underline{q}, t)$ sűrűségfüggvényt. A legfőbb nehézséget a Fokker–Planck-egyenlet nagy dimenziójának kezelése jelenti, mely súlyzóval modellezett szuszpenzió háromdimenziós áramlása esetén hatdimenziós. Természetesen a dimenzió növekszik, ha olyan mechanikai modellt alkalmazunk, melyben nő a szabadságfok. Viszonylag kevesen vizsgálták ezt a megközelítésmódot – nagy valószínűséggel éppen a nagy dimenziószám volt elrettentő hatással arra, hogy a FP-egyenletet közvetlenül próbálják megoldani. 1972-ben Stewart és Sørensen gömbi harmonikus polinomokat használtak a Fokker–Planck-egyenlet megoldására merev súlyzók oldott szuszpenziójának stacionáris nyíróáramlása esetén (ld. [?]). Warner hasonló módszert alkalmazott FENE-típusú súlyzók nyíróáramlásának tanulmányozására (ld. [?]), eredményeit pedig 13 évvel később Fan fejlesztette tovább (ld. [?]). E korai tanulmányok egyszerűsítésképpen csak homogén áramlást vettek figyelembe, amikor is ψ csak $\underline{q}$ és t függvénye. Fan 1989-es cikke (ld. [?]) volt az első olyan munka, melyben determinisztikus megközelítéssel oldottak meg nem homogén $\underline{u}$ vektormezőt. Ebben síkbeli csatorna áramlást szimulált golyó-rúd típusú polimer modellt használva. Amiatt, hogy Fan golyó-rúd típusú modelltől indult ki számításai során, kétdimenziós konfigurációs térrel kellett dolgoznia. S bár ψ függött $\underline{x}$ -től, Fan egyszerűsítésképpen feltette, hogy $\underline{u} \cdot \nabla_{\underline{x}} \psi$, a fizikai tér konvektív tagja, eltűnik (azaz nulla). Fan eredményeit a későbbiekben kiterjesztették úgy, hogy már nem tették fel a fizikai tér konvektív tagjának eltűnését – Nayak a fizikai térben klasszikus Galerkin-módszert használt (ld. [?]), míg Grosso és munkatársai áramvonal-diffúziós módszert használtak a konvektív tag kezelésére (ld. [?]).

Lozinski és Chauvière munkatársaikkal 2003-tól kezdődően egy cikksorozatban jelentősen kiterjesztették a kurrens determinisztikus módszereket (ld. [?, ?, ?, ?, ?]). Egy a szerzők által alkalmazott fontos eljárás az, hogy a Fokker–Planck-egyenletet

minden időintervallumban két részre bontanak:

$$\frac{\tilde{\psi} - \psi^n}{\Delta t} + \tilde{\nabla}_q \cdot \left(\left(\tilde{\kappa}^n q - \frac{1}{2\lambda} F(q) \right) \tilde{\psi} \right) = \frac{1}{2\lambda} \Delta_q \tilde{\psi}, \quad (10)$$

$$\frac{\psi^{n+1} - \tilde{\psi}}{\Delta t} + \tilde{u}^n \cdot \tilde{\nabla}_x \psi^{n+1} = 0. \quad (11)$$

A fenti kifejezésekben $\tilde{\psi}$ egy közbenső érték, $\tilde{u}^n$ és $\tilde{\kappa}^n = (\nabla_x \tilde{u}^n)$ pedig az n időpillanatban van kiértékelve.

Mi is alkalmazzuk ezt az operátor felbontási eljárást a Fokker–Planck-egyenlet végeelem alapú megoldása során (ld. a 2.1.2. részt). Háromdimenziós áramlás esetén például az eljárás azt eredményezi, hogy egy sor háromdimenziós feladatot kell megoldanunk a „teljes” hatdimenzós Fokker–Planck-egyenlet helyett. A dimenzió ilyen való csökkentése révén mérsékeljük az ún. dimenziós átok hatását, mely a rácpontok számának (s ezáltal a probléma számítási bonyolultságának) a dimenzió növelésekor bekövetkező exponenciális növekedésére utal. Lozinski és Chauvière [?, ?, ?] cikkeikben megmutatták, hogy FENE súlyzó modell esetén az általuk javasolt determinisztikus eljárás hatékonyabb a sztochasztikus megközelítésnél bizonyos, a szakirodalomban használt tesztfeladat esetén. Például síkbeli csatornán belüli áramlást vizsgáltak köralakú akadállyal (ld. ?? rész, ahol a problémát tárgyaljuk). Egy sztochasztikus eljárást hasonlítottak össze determinisztikus megoldásukkal és megmutatták, hogy a determinisztikus megközelítés jelentősen hatékonyabb volt a számítási költségek szempontjából, valamint pontosabb is, a sztochasztikus hiba hiányának köszönhetően.

Lozinski és munkatársai eredményei bebizonyították, hogy alacsony dimenziós konfigurációs terű modellek esetén a determinisztikus megközelítés esetenként jobban „teljesít” a sztochasztikusnál. Az azonban még mindig nyitott kérdés, hogy háromnál nagyobb dimenziójú konfigurációs tér esetén a determinisztikus megközelítés mennyire hatékony.

2.1. Determinisztikus algoritmus mikro-makro modell esetére

Ebben a részben ismertetjük a csatolt Fokker–Planck és Navier–Stokes mikro-makro rendszer megoldására kifejlesztett numerikus módszerünket. Megjegyezzük, hogy Barrett, Schwab és Süli, illetve Barrett és Süli cikkeikben (ld. [?], [?]) számos eredményt értek el e rendszer gyenge megoldása létezésével kapcsolatban.

2.1.1. A Navier–Stokes-rendszer numerikus megközelítése

Tekintsük a Navier–Stokes-egyenleteket. Az egyszerűség kedvéért legyen a (4) egyenletben $\rho = 1$, és követve [?]-t a (4) és (5) egyenletek gyenge megfogalmazása

szerint keressük (például homogén Dirichlet-peremfeltétel esetében) a

$$\underline{u} \in [\underline{V}]^d := [H_0^1(\Omega)]^d \quad \text{és} \quad p \in \Pi = \left\{ q \in L^2(\Omega) : \int_{\Omega} q \, d\mathbf{x} = 0 \right\}$$

függvényeket, amikre:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial \underline{u}}{\partial t} \cdot \underline{\tilde{v}} \, d\mathbf{x} + \eta_s \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}} \underline{u} : \nabla_{\mathbf{x}} \underline{\tilde{v}} \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \underline{\tilde{v}}) p \, d\mathbf{x} \\ + \int_{\Omega} (\underline{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \underline{u}) \cdot \underline{\tilde{v}} \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \underline{\tau} : \nabla_{\mathbf{x}} \underline{\tilde{v}} \, d\mathbf{x} = 0, \end{aligned} \quad (12)$$

és

$$\int_{\Omega} (\nabla_{\mathbf{x}} \cdot \underline{u}) q \, d\mathbf{x} = 0, \quad (13)$$

minden $\underline{v} \in [\underline{V}]^d = \times_{i=1}^d V$ és $q \in \Pi$ esetén, ahol $\underline{A} : \underline{B} = \sum_{i,j=1}^d A_{ij} B_{ij}$ az $\underline{A}$ és $\underline{B}$ mátrixok skalárszorzata. Vegyes, esetleg nem homogén, Dirichlet–Neumann-peremfeltétel esetén a peremfeladat gyenge alakja hasonló, de a V és Π függvényterek definíciói kissé megváltoznak. Az 1. részben tárgyaltak szerint $\underline{\tau}$, a polimer extra-feszültségi tenzora, kiszámítható a Fokker–Planck-egyenlet megoldásából. Ez az a kifejezés, mellyel a mikro és makro egyenletek csatolódnak.

A továbbiakban feltesszük, hogy $\underline{\tau}$ egy adott forrás tag. Az FP-egyenlet numerikus megoldási módszerének részletei, illetve $\underline{\tau}$ kiszámításának leírása a 2.1.2. részben található.

Ahhoz, hogy az NS-egyenletek gyenge formáját végeelem módszerrel implementáljuk, (12) és (13) mindegyikét felbontjuk három egyenletre, $\underline{u} = (u_x, u_y, u_z)$ minden egyes komponensének megfelelően. Itt u_x az $\underline{u}$ sebességmező x komponense. Ekkor u_x -re azt kapjuk, hogy meg kell találnunk az $u_x \in V$ és $p \in \Pi$ leképezéseket, amikre

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \frac{\partial u_x}{\partial t} v_x \, d\mathbf{x} + \eta_s \int_{\Omega} \nabla_{\mathbf{x}} u_x \cdot \nabla_{\mathbf{x}} v_x \, d\mathbf{x} - \int_{\Omega} p \frac{\partial v_x}{\partial x} \, d\mathbf{x} \\ + \int_{\Omega} (\underline{u} \cdot \nabla_{\mathbf{x}} u_x) v_x \, d\mathbf{x} + \int_{\Omega} \left(\tau_{xx} \frac{\partial v_x}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial v_x}{\partial y} + \tau_{xz} \frac{\partial v_x}{\partial z} \right) d\mathbf{x} = 0, \end{aligned} \quad (14)$$

és

$$\int_{\Omega} q \frac{\partial u_x}{\partial x} \, d\mathbf{x} = 0, \quad (15)$$

minden $v_x \in V$ és $q \in \Pi$ esetén. Természetesen (14) és (15) hasonló csatolt egyenletekre vezetnek u_y és u_z szerint.

Legyen $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ a V vektortér egy V^h véges dimenziós alterének bázisa, s hasonlóan $\text{span}\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{N'}\} = \Pi^h$. A vegyes módszer stabilitásához (vagyis a Babuška–Brezzi-féle „inf-sup” feltétel teljesüléséhez, ld. [?]) a V^h alteret darabonként kvadrátikus, folytonos függvények alterének választjuk, míg Π^h darabonként lineáris, folytonos függvények altere. Térben és időben diszkrétizálva az egyenleteket azt kapjuk, hogy $U_x^n(\underline{x}) = \sum_j u_x^{n,j} \phi_j(\underline{x})$ és $P^n(\underline{x}) = \sum_j p^{n,j} \psi_j(\underline{x})$. Itt az n felső index a $t = t^n = n\Delta t$ pillanatban vett értékre, a nagybetűs változók pedig a megfelelő folytonos változók diszkrét verzióira utalnak. Az U_x^n és P^n változókat behelyettesítve a (14) és (15) egyenletekbe és időben retrográd Euler módszert használva azért, hogy az időintervallumok mérete tetszőleges maradjon stabilitás mellett, a diszkrét variációs probléma a következő: minden $n = 0, \dots, M$ esetén (ahol $M = T/\Delta t$) találjunk olyan $\underline{X}^n = (\underline{x}^n, \underline{y}^n, \underline{z}^n, \underline{p}^n)^T \in \mathbb{R}^{3N+N'}$ vektort, amire

$$\begin{aligned}
 F_x^i(\underline{X}^{n+1}) := & \sum_{j=1}^N u_x^{n+1,j} \int_{\Omega} \left(\phi_j \phi_i + \Delta t \eta_s \left(\nabla_x \phi_j \cdot \nabla_x \phi_i \right) \right) d\tilde{x} \\
 & + \Delta t \int_{\Omega} \left[\left(\sum_{j=1}^N u_x^{n+1,j} \phi_j \right) \left(\sum_{j=1}^N u_x^{n+1,j} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \right) \right. \\
 & + \left(\sum_{j=1}^N u_y^{n+1,j} \phi_j \right) \left(\sum_{j=1}^N u_x^{n+1,j} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \right) \\
 & + \left. \left(\sum_{j=1}^N u_z^{n+1,j} \phi_j \right) \left(\sum_{j=1}^N u_x^{n+1,j} \frac{\partial \phi_j}{\partial z} \right) \right] \phi_i d\tilde{x} \\
 & + \Delta t \int_{\Omega} \tau_{xx} \frac{\partial \phi_i}{\partial x} + \tau_{xy} \frac{\partial \phi_i}{\partial y} + \tau_{xz} \frac{\partial \phi_i}{\partial z} d\tilde{x} \\
 & - \Delta t \sum_{j=1}^{N'} p_j^{n+1} \int_{\Omega} \psi_j \frac{\partial \phi_i}{\partial x} d\tilde{x} - \sum_{j=1}^N \int_{\Omega} u_x^{n,j} \phi_j \phi_i d\tilde{x} = 0, \quad (16)
 \end{aligned}$$

és

$$G_x^{i'}(\underline{X}^{n+1}) := \sum_{j=1}^N u_x^{n+1,j} \int_{\Omega} \psi_{i'} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} d\tilde{x} = 0, \quad (17)$$

minden $\phi_i, i = 1, \dots, N$, és $\psi_{i'}, i' = 1, \dots, N'$, esetén. Egyszerűsítésképpen $F_x^i(\underline{X}^{n+1})$, valamint $G_x^{i'}(\underline{X}^{n+1})$ jelöli a (16), illetve (17) egyenlet bal oldalát, s hasonlóképpen definiáljuk az $F_y^i(\underline{X}^{n+1})$, $F_z^i(\underline{X}^{n+1})$ és $G_y^{i'}(\underline{X}^{n+1})$, $G_z^{i'}(\underline{X}^{n+1})$ kifejezéseket u_y , illetve u_z esetén. A (16) és (17) egyenletek, illetve az y és z változó szerinti megfelelőik mindegyike egy vektort határoz meg, például $\underline{F}_x(\underline{X}) = (F_x^1(\underline{X}), \dots, F_x^N(\underline{X}))^T \in \mathbb{R}^N$. A $\underline{G}_x, \underline{G}_y, \underline{G}_z \in \mathbb{R}^{N'}$ vektorokat egyetlen

$\tilde{G} \in \mathbb{R}^{N'}$ vektorba egyesítjük, melyet

$$\tilde{G}'(\tilde{X}^{n+1}) := \sum_{j=1}^N \left(u_x^{n+1,j} \int_{\Omega} \psi_{i'} \frac{\partial \phi_j}{\partial x} dx + u_y^{n+1,j} \int_{\Omega} \psi_{i'} \frac{\partial \phi_j}{\partial y} dx + u_z^{n+1,j} \int_{\Omega} \psi_{i'} \frac{\partial \phi_j}{\partial z} dx \right) = 0$$

határoz meg.

Legyen $\underline{H} = (\underline{F}_x, \underline{F}_y, \underline{F}_z, \underline{G})^T \in \mathbb{R}^{3N+N'}$. Ahhoz, hogy kiszámíthassuk a diszkrét NS-rendszer megoldását az $n+1$. pillanatban, a $\underline{H}(\underline{X}^{n+1}) = \underline{0}$ nemlineáris egyenletrendszert kell megoldanunk. Ehhez Newton-módszert használunk. Jelölje J a rendszer Jacobi-determinánsát. A J mátrix elemeit $\underline{H}(\underline{X}^{n+1})$ vektor $\underline{X}^{n+1}$ komponensei szerinti deriváltjai segítségével számítjuk ki. Tegyük fel, hogy az $\underline{X}^{n+1}$ megoldás vektorunkat úgy rendezzünk, hogy az első N komponense meg-
egyeznek az $\underline{u}_x^{n+1}$ vektor komponenseivel, akkor $1 \leq i, j \leq N$ esetén

$$J_{ij} = \frac{\partial F_x^i(\underline{X}^{n+1})}{\partial u_x^{n+1,j}} = \int_{\Omega} \phi_j \phi_i + \\ + \Delta t \left(\eta_s \left(\nabla_x \phi_j \cdot \nabla_x \phi_i \right) + \left(\phi_j \frac{\partial u_x^{n+1}}{\partial x} + \underline{u}_x^{n+1} \cdot \nabla_x \phi_j \right) \phi_i \right) dx.$$

J többi elemét hasonlóan számítjuk ki. Ezek után feltéve, hogy a közelítő megoldás k -dik iteráltja a t^n pillanatban $\underline{X}_k^n$ és Newton módszerét alkalmazva azt kapjuk, hogy

$$J \underline{X}_{k+1}^{n+1} = J \underline{X}_k^{n+1} - \underline{H}(\underline{X}_k^{n+1}).$$

A megelőző pillanatban kapott megoldást használva kezdeti vektornak – amit $\underline{X}_0^{n+1}$ jelöl –, iterációt alkalmazva kiszámítjuk az $\underline{X}_k^{n+1}$ vektorokat, amíg csak $\|\underline{X}_{k+1}^{n+1} - \underline{X}_k^{n+1}\| < \text{TOL}$ igaz nem lesz. Itt „TOL” egy előre meghatározott tolerancia értéket jelöl.

2.1.2. A Fokker–Planck-egyenlet numerikus megközelítése

Ebben a részben egy végeelem alapú módszert mutatunk be a (7) egyenlet megoldására. Első lépésként, a fentieket követve, felbontjuk az operátort s így két egyenletet kapunk: egy konfigurációs térnek és egy fizikai térnek megfelelőt (ld. a (10), illetve (11) egyenleteket). Vegyük észre, hogy ezek diszkrétizált egyenletek, mely a retrográd Euler-módszer eredménye. A Navier–Stokes esethez hasonlóan ezt azért alkalmazzuk, hogy ne legyen korlátozva az időintervallumok hossza. A Fokker–Planck-egyenlet esetében nem előnyös a Crank–Nicolson-módszert használni, mivel a sebességmezőt a $t = t^n$ és nem a $t = t^{n+1/2}$ pillanatban számítjuk ki, s ezért a közelítő megoldások sorozata nem konvergál másodrendben Δt szerint.

Így a háromdimenziós FENE súlyzó modellre koncentrálunk, bár a kétdimenziós FENE esetben hasonló eredmények igazak, valamint a Hooke-féle súlyzó modell esetében is. A háromdimenziós FENE súlyzó modell esetében $\tilde{F}(q)$ -t a (6) egyenlet határozza meg.

A (10) egyenlet gyenge formája alkalmazásával a konfigurációs térbeli feladat a következő: találjuk meg $\tilde{\psi} \in K$ -t, amire:

$$\int_D \tilde{\psi} v \, dq + \frac{\Delta t}{2\lambda} \int_D \nabla_q \tilde{\psi} \cdot \nabla_q v \, dq + \Delta t \int_D \nabla_q \cdot \left(\left(\kappa^n q - \frac{1}{2\lambda} \tilde{F}(q) \right) \tilde{\psi} \right) v \, dq = \int_D \psi^n v \, dq, \quad (18)$$

minden $v \in K$ esetén. A (18) egyenletben a diffúziós tag parciális integrálása után megjelenő perem-tag eltűnik a $\psi|_{\partial D} = 0$ Dirichlet-feltétel miatt. Ezen kívül, mivel ebben a modellben feltesszük, hogy a súlyzót alkotó két golyó megkülönböztethetetlen, a parciális differenciálegyenlet megoldása szimmetrikus lesz az origóra. Lásd a [?, ?] cikket e variációs probléma K függvényterének helyes választásáról.

Ahhoz, hogy a (18) egyenletet numerikusan megoldjuk, természetesen adódik, hogy a D tartományt átírjuk gömbi koordináták segítségével, azaz

$$q = (\rho \cos \theta \sin \varphi, \rho \sin \theta \sin \varphi, \rho \cos \varphi)$$

ahol $(\rho, \theta, \varphi) \in (0, \sqrt{b}) \times (0, 2\pi) \times (0, \pi)$. Ekkor periodikus peremfeltétellel kell dolgoznunk θ szempontjából, mivel a θ változó 2π -vel való elforgatása az identitás operátor. Chauvière és Lozinski munkáját követve (ld. [?]) feltesszük, hogy ψ alakja

$$\psi(x, \rho, \theta, \varphi, t) = \Psi_0(\rho) \alpha(x, \rho, \theta, \varphi, t), \quad (19)$$

ahol $\Psi_0(\rho) = (1 - \rho^2/b)^s$ és s egy pozitív állandó. Ha s -t megfelelően választjuk, akkor a behelyettesítés automatikusan homogén Dirichlet-feltételt ad, azaz $\psi = 0$ a ∂D peremen, numerikusan stabil módon, az $\tilde{F}$ függvény $\rho = \sqrt{b}$ pontban fellépő szingularitása ellenére. [?]-al egyetértésben, empirikusan beláttuk, hogy $s = 2.5$ esetén egy stabil numerikus rendszert kapunk, s ezt az értéket használtuk a ?? részben tárgyalt eredmények esetében.

Most tehát készen állunk arra, hogy implementáljuk a javasolt végeelem módszer egyenletrendszerünk esetében.

Legyen $K_\alpha = \{\alpha : \Psi_0 \alpha \in K\}$ és tegyük fel, hogy $K_{\alpha,h}$ a K_α függvényter egy véges-dimenziós altere $\{\phi_1, \dots, \phi_N\}$ bázissal. Az alábbi lépések segítségével a (18) egyenlet térben diszkretizált verzióját kapjuk α függvényében:

- (i) végezzük el a (19) helyettesítést;
- (ii) legyen $\tilde{\alpha}_h = \sum_j \tilde{\alpha}_j \phi_j$;
- (iii) legyen $v = \phi_i$;

- (iv) értékeljük ki az integrálokat a $(\rho, \theta, \varphi) \in (0, \sqrt{b}) \times (0, 2\pi) \times (0, \pi)$ tartomány felett.

Mindezek után a következő egyenletrendszert kapjuk $i = 1, 2, \dots, N$ -re:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^N \tilde{\alpha}_j \int_0^{\sqrt{b}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} & \left[\Psi_0 \phi_j \phi_i + \Delta t \left(\nabla_q \cdot \left(\left(\kappa^n q - \frac{1}{2\lambda} F(q) \right) \Psi_0 \phi_j \right) \phi_i + \right. \\ & \left. + \frac{1}{2\lambda} \nabla_q (\Psi_0 \phi_j) \cdot \nabla_q \phi_i \right) \right] \rho^2 \sin \varphi \, d\varphi \, d\theta \, d\rho = \\ & = \int_0^{\sqrt{b}} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \Psi_0 \alpha^n \phi_i \rho^2 \sin \varphi \, d\varphi \, d\theta \, d\rho. \end{aligned} \quad (20)$$

Ezek után a Fokker–Planck-egyenlet fizikai térbeli részét tekintjük (ld. (11)). A (19) egyenletbeli helyettesítés után Ψ_0 kiemelhető az egyenlet minden egyes tagjából, s így a variációs probléma a következőképpen alakul: meg kell találnunk azt az α^{n+1} függvényt K_α -ban, amire

$$\int_{\Omega} \alpha^{n+1} v \, d\mathbf{x} + \Delta t \int_{\Omega} (\mathbf{u}^n \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \alpha^{n+1}) v \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \tilde{\alpha} v \, d\mathbf{x}, \quad (21)$$

minden K_α -beli v esetén. Alkalmazva az $\alpha^h = \sum_j \alpha_j \phi_j$ és $v = \phi_i$ végeselem diszkretizációt (ahol $\text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_N\} = K_{\alpha,h} \subset K_\alpha$) azt kapjuk, hogy

$$\sum_{j=1}^N \alpha_j^{n+1} \int_{\Omega} (\phi_j + \Delta t (\mathbf{u}^n \cdot \nabla_{\mathbf{x}} \phi_j)) \phi_i \, d\mathbf{x} = \int_{\Omega} \tilde{\alpha} \phi_i \, d\mathbf{x}, \quad (22)$$

$i = 1, 2, \dots, N$ esetén. Ez egy tisztán hiperbolikus egyenlet Galerkin formája. Eddigi számításaink alapján úgy tűnik (ld. a ??-részt), hogy ez az egyszerű módszer elfogadható. Azonban nagyon előnyös lenne a (21) egyenlet diszkretizálására egy, a klasszikus Galerkin-módszernél stabilabb, módszert használni. Lozinski és Chauvière ecélből spektrál elem alapú áramvonal-diffúziós (Streamline-Upwind Petrov-Galerkin (SUPG)) módszert használtak (ld. [?] és [?] a részletes leírásért).

Vegyük észre, hogy (22) nem függ a konfigurációs térbeli helyzettől. Ez egy nagyon fontos részlet, mivel azt jelenti, hogy a (22) egyenlet szoftveres implementálásakor a rendszer mátrixát időlépésenként csak egyszer kell felállítanunk. Sajnos a (20) egyenletnek nincs meg ez a tulajdonsága, mivel κ függ $\mathbf{x}$ -től inhomogén sebességmezők esetén.

Miután ψ -t kiszámítottuk, a Kramers-képletet kell használnunk a polimer $\tau_{\approx}(\mathbf{x}, t)$ extra-feszültségének meghatározására, $(\mathbf{x}, t) \in \Omega \times (0, T]$ mellett. Ez egy D feletti integrál kiszámítását jelenti, melyhez szükségünk van a Kramers-képletre α

függvényében:

$$\tau(x, t^n) = \zeta_p \left(-I + \int_0^{\sqrt{b}} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi w \otimes \right. \\ \left. \otimes w \frac{\rho^4}{1 - \rho^2/b} \Psi_0 \alpha^n(x, \rho, \theta, \varphi) \sin \varphi \, d\varphi \, d\theta \, d\rho \right), \quad (23)$$

ahol $\zeta_p = \frac{\eta_p(b+d+2)}{b\lambda} n_p kT$ és $w = (\cos \theta \sin \varphi, \sin \theta \sin \varphi, \cos \varphi)$.

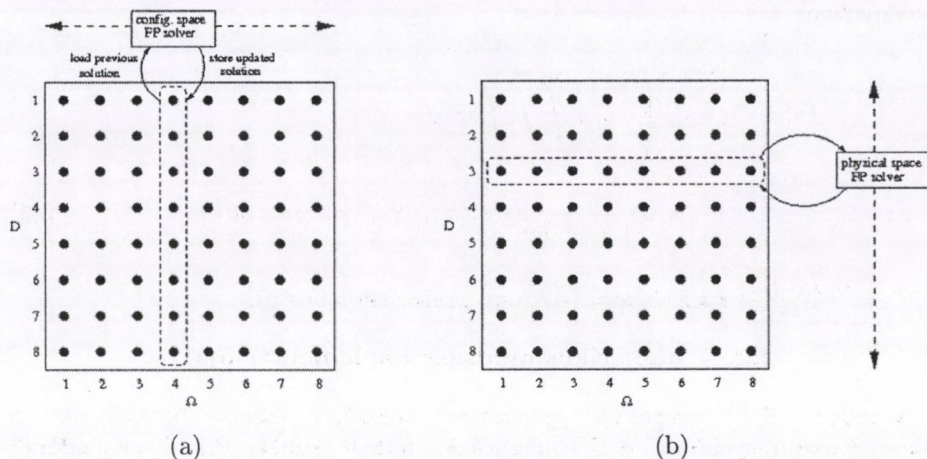
2.2. A numerikus módszer implementációja

A teljes NS-FP megoldási „gépezetet” különálló részekre bonthatjuk: a „Navier–Stokes-megoldóra”, a D konfigurációs térbeli „Fokker–Planck-megoldóra”, az Ω fizikai térbeli „Fokker–Planck-megoldóra”, s végül a Kramer-kifejezésre, amit τ kiszámítására használunk. Ezek mindegyikét implementáltuk a libMesh nevű végelem könyvtárt használva. A libMesh egy nyitott forráskódú, parallel számítási módszert használó, C++ nyelven íródott szoftver, melyet a „University of Texas at Austin” egyetemen fejlesztettek ki. Számításaink eredményeit a 3. részben összegeztük.

Az implementálás egy lényeges aspektusa, hogy hogyan kezeljük az FP-egyenlet hatváltozós (azaz t -t is figyelembe véve hétváltozós) α megoldását. A kérdést egyszerűen közelítettük meg: az α megoldást minden egyes időbeli lépésben egy olyan mátrixban tároljuk, melynek minden egyes sora egy konfigurációs térbeli rácspontnak megfelelő fizikai térbeli megoldás háromdimenziós keresztmetszetét tartalmazza. Hasonlóan, minden oszlop egy konfigurációs térbeli keresztmetszetet tartalmaz. Ezek után α „frissítése” az egyes keresztmetszetek egymás utáni frissítésével történik.

Az alábbi lista a teljes számítási eljárás egy pontosabb leírását adja.

1. Kezdetben a rendszert egyensúlyi helyzetbe állítjuk az $\underline{u}(x, 0) = \underline{0}$ és $\psi(x, q, 0) = \psi_{eq}(q)$ választással. Itt $\psi_{eq}(q) = C(1 - |q|^2/b)^{b/2}$ és C egy normalizációs állandó (ld. [5]). Legyen még $\tau(x, 0) = \underline{0}$, mivel egyensúlyi helyzetben a polimer extra-feszültségi tenzora eltűnik.
2. Vegyünk egy nem nulla beáramlási peremfeltételt az $\underline{u}$ további peremfeltételeinek megfelelő beállításával, és frissítsük a sebességmezőt a 2.1.1. bekezdésben tárgyalt Navier–Stokes-megoldó segítségével.
3. Frissítsük α -t D szempontjából úgy, hogy a fizikai tér hálója rácspontjai felett iterálunk, és a (20) egyenlet segítségével frissítjük a konfigurációs térbeli keresztmetszeteket.
4. Frissítsük α -t Ω szempontjából minden D -beli rácspontra, a (22) egyenletben megadott Galerkin-implementáció segítségével. Mint ahogy korábban

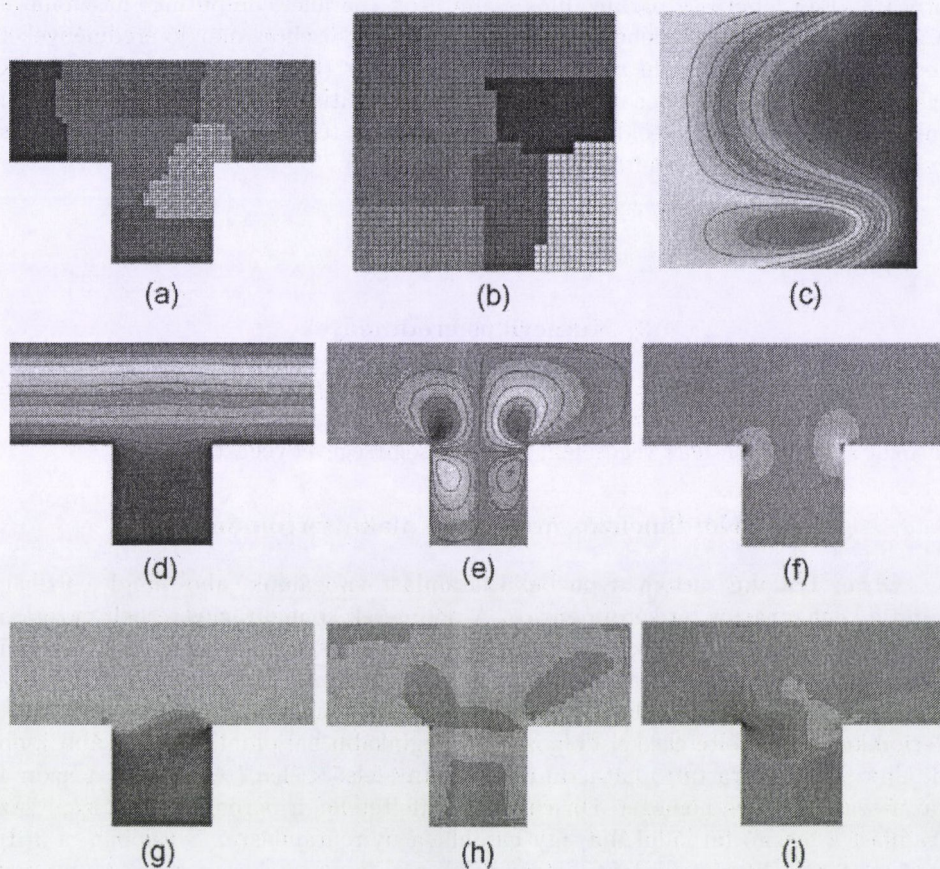


2. ábra. Ez az ábra a Fokker–Planck-egyenlet megoldásának operátor felbontásos módszerét illusztrálja. Minden egyes időbeli lépésben először (a) frissítünk minden egyes konfigurációs térbeli keresztmetszetet, aztán (b) frissítünk minden egyes fizikai térbeli keresztmetszetet.

is említettük, ebben az esetben elég a rendszer mátrixát egyszer felállítani minden egyes időintervallumra. Ez azt eredményezi, hogy a fizikai térbeli frissítések lényegesen kevesebb CPU időt igényelnek, s a különbség nő a feladat méretének növekedésével.

5. Frissítsük τ -t a frissített Fokker–Planck-megoldás alapján, a (23) egyenlet integrálja kiszámításával, melyhez Gauss-kvadratúrát használunk.
6. Frissítsük u -t – erre a frissített τ polimer extra-feszültségi tenzor van hatással. Térjünk vissza a 3. lépéshez, és ismételjük a 3–6 folyamatot, amíg valamely leállási feltétel, mint például $\frac{\|u^{n+1} - u^n\|_\infty}{\Delta t} < \text{TOL}$, igaz nem lesz.

A fenti algoritmus legnagyobb része az α leképezés konfigurációs térbeli frissítésével telik. Nagyon fontos volna e lépés optimalizálása. Lozinski és Chauvière [23]-ban egy olyan „gyors Fokker–Planck-megoldót” dolgoztak ki, melynek köszönhetően algoritmusuk teljes CPU időigénye több mint 60-as szorzóval javult. Ezt a (18) egyenletben levő, spektrális módszerből adódó, kifejezés átrendezésével érték el, mellyel megmutatták, hogy számos mátrix és inverzük előre kiszámítható, s újra és újra felhasználható minden egyes megoldás során, ezzel drasztikusan csökkentve a konfigurációs térbeli megoldásokhoz szükséges munka mennyiségét. Ez azonban nem alkalmazható végeselem megközelítés során; viszont a végeselem módszer egyik nagy előnye, hogy segítségével szinte kizárólag ritka mátrix algebrát tudunk



3. ábra. Az (a) és (b) ábrán a 8 processzor közötti terhelés megoszlása látható, a fizikai és konfigurációs térbeli hálóknak megfelelően. A csatorna Ω -beli fő részének egy x pontjához tartozó konfigurációs térbeli α keresztmetszete a (c) ábrán látható. Ez a keresztmetszet hasonlít a nyíróáramláshoz tartozó FP-egyenlet megoldására, mint ahogy az várható volt. A (d), (e) és (f) ábrákon u_x , u_y illetve p függvények stacionáris megoldásait láthatjuk, τ komponenseit pedig az utolsó sorban (azaz τ_{xx} -t a (g), τ_{xy} -t a (h) és τ_{yy} -t az (i) ábrán).

alkalmazni. Mivel ritka mátrix inverze általában teljesen kitöltött mátrix, nem kívánatos ezeket explicite kiszámítani.

Így tehát más megoldást kell találnunk a Fokker–Planck-megoldó felgyorsítására. Egy lehetőség párhuzamos számítások (parallel computing) használata. A libMesh könyvtár ezt lehetővé teszi, és ez a megközelítés már jó eredményeket hozott nagy nagyságrendű számítások elvégzésekor (ld. a 3. részt). Egy másik ötlet (melyet a 4. részben tárgyalunk) az, hogy ritkított térhálót (sparse grid) használunk azért, hogy csökkentsük a konfigurációs térbeli rács szabadságfokát, s ezáltal csökkentsük a számításokhoz szükséges időt.

3. Numerikus eredmények

Ebben a részben bemutatjuk a polimer áramlások numerikus modelljei alapján kapott eredményeinket mind két-, mind pedig háromdimenziós esetben. A számításokat a 2. részben leírt végeselem módszer segítségével végeztük.

3.1. Kétdimenziós áramlás T alakú tartományban

Olyan T alakú tartományon belüli áramlást vizsgálunk, ahol mind a fizikai, mind a konfigurációs tér kétdimenziós. A polimerek konfigurációs térbeli mozgása általában nem korlátozódik ugyanarra a kétdimenziós síkra, még a fizikai térbeli lamináris sebességmező esetén sem, úgyhogy kétdimenziós konfigurációs térrel dolgozni nem reális (ld. [9]). Most mégis ezt az esetet vizsgáljuk egyszerűsítés céljából. Periodikus peremfeltételekkel dolgozunk Ω leginkább bal oldali és leginkább jobb oldali szélén, jobbra tartó határral a tartomány felső szélén (tehát $u_x = 1$ azon a határ-szakaszon) és homogén Dirichlet-peremfeltétellel a perem többi részén. Az áramlást a mozgó fal indukálja, így hasonlít a nyíróáramlásra. S valóban, a 3(d) ábrán látható, hogy a csatorna legnagyobb részén u_x csak egy kicsit tér el egy egyszerű nyíróáramlás sebességmezőjétől. Itt a $\lambda = 1, b = 10, \eta_p = 1.439$ és $\eta_s = 1$ paramétereket használtuk.

Ezt a szimulációt a Texas Advanced Computing Centre számítástechnikai központ (<http://www.tacc.utexas.edu>) Lonestar nevű parallel számítógépe 8 processzán futtattuk. 100 időintervallumot kellett használnunk, $\Delta t = 0.05$ léptékkel ahhoz, hogy elérjük a 3. ábrán látható stacionáris megoldást. A számítás 81 másodpercet vett igénybe időintervallumonként, melynek 71%-a konfigurációs térbeli, míg 23%-a fizikai térbeli frissítésekkel telt.

Polytonos bázisfüggvényekkel dolgoztunk. A fizikai térbeli háló 1024 bi-kvadratikus elemből (4257 rácpontból) állt, míg a konfigurációs téré 400 bi-kvadrikus elemből (1681 rácpontból).

3.2. Henger körüli kétdimenziós áramlás

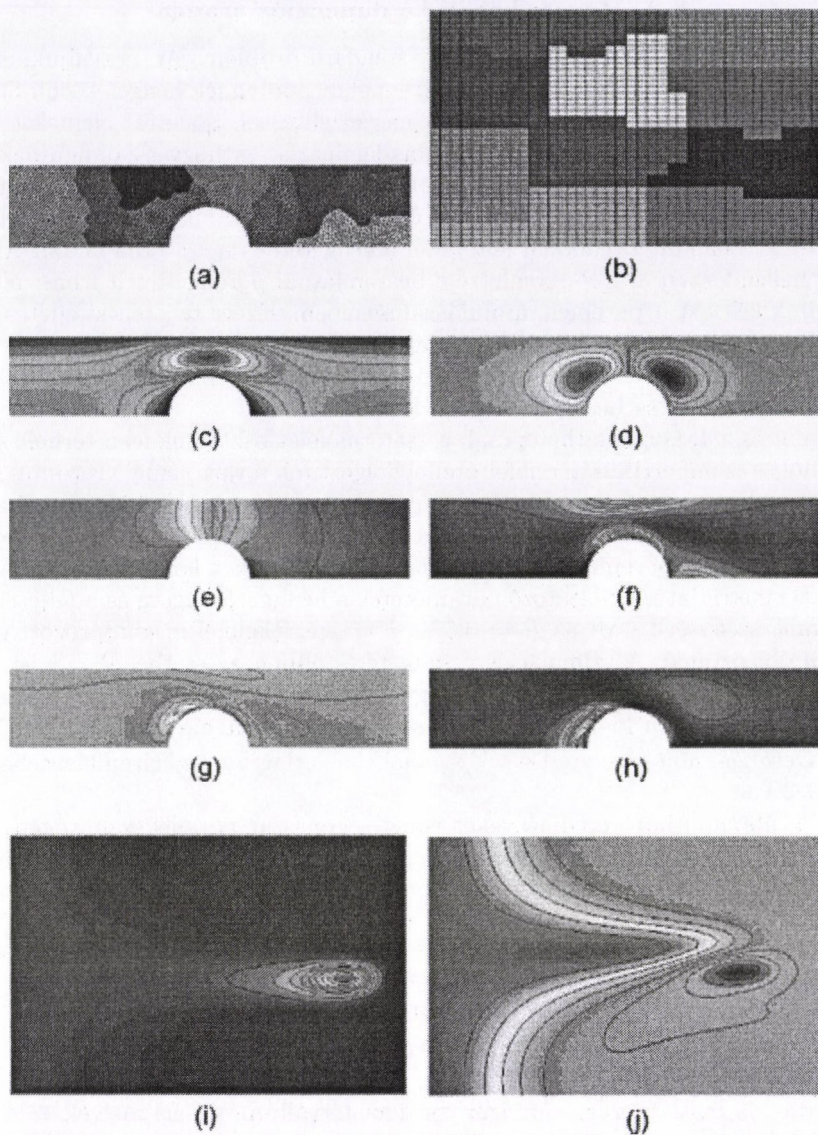
A következőkben a szakirodalom egy standard problémáját tárgyaljuk, melyet gyakran használnak viszonyítási alapnak – polimer-folyadék henger körüli Stokes-áramlását; (ld. [9, 23] determinisztikus megközelítéssel, spektrál elemeket használva). Ismét feltesszük, hogy az áramlás lamináris, és hogy a konfigurációs tér kétdimenziós. A sebesség szempontjából a következő megszorításokkal éltünk: a bal és jobb peremen u_x esetében parabolikus ki- és beáramlási peremfeltételekkel dolgoztunk, valamint tapadó fal feltétellel a hengeren és a csatorna falain. Ahhoz, hogy a fizikai térben az FP-egyenletre a beáramlásnál peremfeltételt írassunk elő, ismernünk kell ψ -t a peremen, áramlással szemben. Ezért teljesen kifejtett áramlással dolgozunk a perem közelében, azaz a beáramlási peremfeltétel parabolikus formájával. Így a vonatkozó valószínűségi sűrűségfüggvény az adott peremfeltételek mellett kiszámítható és beáramoltatható Ω -ba.

Amint az a 4. ábrán látható, csak a csatorna felét osztottuk fel a térháló szempontjából és szimmetrikus peremfeltétellel dolgoztunk a tartomány vízszintes szimmetriatengelye mentén. Ezt azért tehetjük meg, mert henger körüli Stokes-áramlás mindenképpen szimmetrikus. A félhenger keresztmetszetét képező félkör mentén homogén Dirichlet-peremfeltételt alkalmaztunk y mindkét komponensére. A fizikai tér geometriáját meghatározó paraméterek a henger R sugara és a fél-csatorna y -irányú h szélessége. Mi az $R = 0.5$ és $h = 1$ értékekkel meghatározott tartományon dolgoztunk. A szimulációs paraméterek ebben az esetben $\lambda = 1$, $b = 20$, $\eta_p = 1.439$ és $\eta_s = 1$ voltak. Ahhoz, hogy eredményeinket össze lehessen hasonlítani a [23]-beliekkel a ki- és beáramlási sebességprofilokat úgy választottuk, hogy az ún. *Deborah-szám* (melyre $De = \frac{\lambda \bar{U}}{R}$, ahol $\bar{U}$ az átlag be- és kiáramlási sebesség) éppen 1.2 volt.

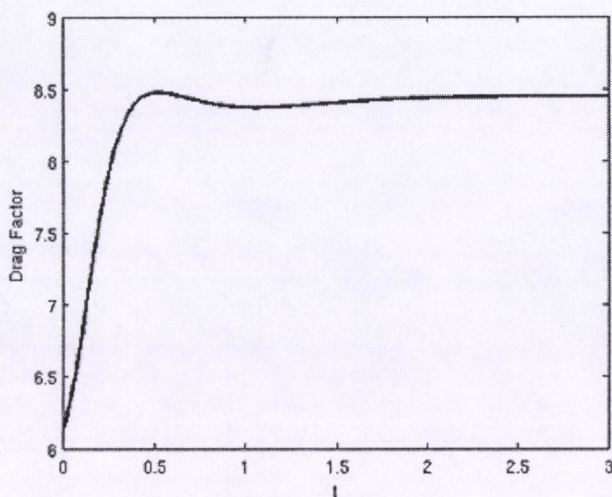
A 4. ábrán látható eredményeket ismét a Lonestar parallel számítógép segítségével kaptuk, ebben az esetben 10 processzort használva. A fizikai és konfigurációs térbeli terhelés megoszlása a 4-es ábrán látható. 300 időintervallumot kellett használnunk, $\Delta t = 0.01$ léptékkel ahhoz, hogy elérjük a stacionáris megoldást. Triangulált fizikai térbeli hálóval dolgoztunk a Triangle nevű háló-generáló szoftver segítségével (ld. [30]), mely 1062 elemből (2239 rácspontból) állt. Folytonos, darabonként kvadratikus bázisfüggvényeket alkalmaztunk a sebességvektor komponensei esetében és folytonos, darabonként lineárisakat a nyomásra. A fizikai és konfigurációs tér halói 400 bi-kvadratikus elemből (1681 rácspontból) álltak. Ez a számítás 49 másodpercet vett igénybe időintervallumonként, melyek 71%-át a konfigurációs térbeli, míg 24%-át a fizikai térbeli frissítések emésztették fel.

E viszonyítási alapként használt áramlás numerikus modelljei közötti különbségek kimutatására gyakran használják a henger körüli ún. *közegellenállási tényező* (*drag factor*) makroszkopikus mennyiséget. Ezt F^* jelöli; pontos definíciója megtalálható [23]-ben.

A fenti eredményekhez tartozó F^* értékeket kiszámítottuk $t \in [0, 3]$ esetében és az így kapott adatokat az 5. ábrán foglaltuk össze. Ez megegyezik a [23] cikkben közölt eredményekkel $De = 1.2$ esetén.



4. ábra. Az (a) és (b) ábrán a 10 processzor közötti terhelés megoszlása látható. A stacionális megoldáshoz tartozó sebesség u_x és u_y komponensei, valamint a nyomás a (c), (d), illetve (e) ábrán, a τ_{xx} , τ_{xy} és τ_{yy} komponensek az (f), (g), illetve (h) ábrán láthatóak. Annak illusztrálására, hogy az FP-egyenlet konfigurációs térbeli megoldása hogyan függ a fizikai térbeli helyzettől, az (i) és (j) ábrán α két különböző D -beli keresztmetszete látható.



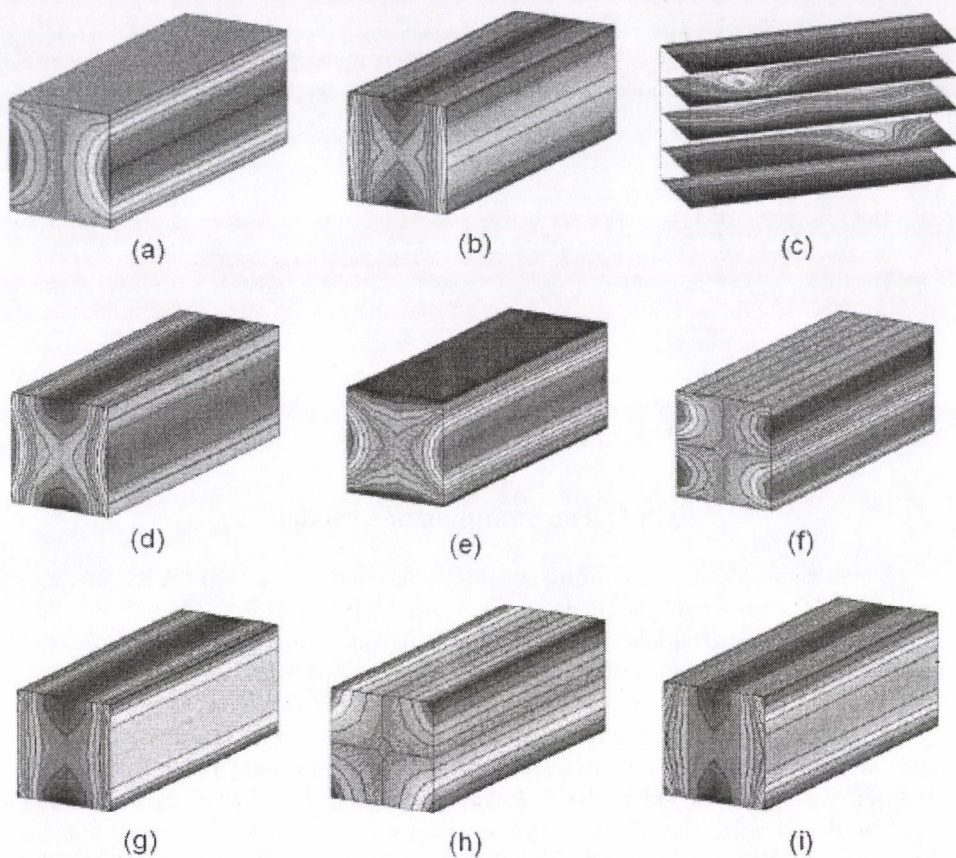
5. ábra. Az közegellenállási tényező (drag factor) idő szerinti függvénye a henger körüli áramlás esetében.

3.3. Háromdimenziós modell

Végül tekintsük a háromdimenziós áramlás esetét. A fizikai tér ebben az esetben egy téglatest alakú csatorna, s az áramlást ismét mozgó fal peremfeltételek indukálják. A csatorna két végén periodikus peremfeltételekkel dolgozunk. Ebben az esetben csak egy nem nulla sebességkomponensünk van és ez u_y . A $\lambda, b, \eta_s, \eta_p$ szimulációs paraméterek ugyanazok, mint a 3.1. részben.

A konfigurációs tér hálójá $10 \times 10 \times 10$ darab téglatestből állt; folytonos, darabonként tri-kvadrátikus bázisfüggvényeket alkalmazunk a sebesség esetében, és folytonos, darabonként tri-lineárisakat a nyomásra. A fizikai tér hálójá meglehetősen durva volt: mindössze $4 \times 4 \times 4$ darab téglatestből állt. A szimulációt a Lonestar parallel számítógép 8 processzorán futtattuk, 60 időintervallumot használva $\Delta t = 0.05$ léptékkel, s a számítás átlagosan 129.9 másodpercet vett igénybe időintervallumonként. A számítási idő megoszlása hasonlít a kétdimenziós esethez: a CPU idő 74%-a konfigurációs térbeli, míg 20%-a fizikai térbeli frissítésekkel telt. Az α mezőt és a feszültségi tenzor komponenseit a 6. ábrán mutatjuk be.

A teljes háromdimenziós (azaz háromdimenziós fizikai és háromdimenziós konfigurációs térrel) való számítás sok kihívással jár. Ismereteink szerint ez a jelen munka az első olyan, ahol determinisztikus módszert használnak teljes háromdimenziós modell kidolgozására (Lozinski és Chauviert háromdimenziós konfigurációs és kétdimenziós fizikai teret vettek [8]-ban). Szándékunkban áll ennél összetettebb háromdimenziós áramlások modellezése is; ez azonban nem egyszerű fel-



6. ábra. Az ábrán a következő stacionális megoldások láthatók: (a) u_y (u_x és u_z azonosan nulla, ezért ezeket nem ábrázoljuk), (b) p , (c) α keresztmetszete a konfigurációs térben, (d) τ_{xx} , (e) τ_{xy} , (f) τ_{xz} , (g) τ_{yy} , (h) τ_{yz} , (i) τ_{zz} .

adat. Az elsődleges nehézség abban áll, hogy a térháló szabadságfokának növekedésével egyre több egymás utáni frissítésre van szükség mind a konfigurációs, mind a fizikai térben.

A számításokhoz használt processzorok számának növelése legfeljebb állandó értéken tartja az egyes frissítésekhez szükséges időt (ahogy a térháló finomodik), de mivel több frissítésre van szükség – sőt, lényegesen többre, mivel három dimenzióban a szabadságfok gyorsan nő –, a számításhoz szükséges teljes CPU idő is nőni fog.

A későbbiekben szándékunkban áll különféle numerikus módszereket megvizsgálni abból a szempontból, hogy ezen a problémán javítsunk.

4. További tervek, végszó

Munkánkat számos területen fogjuk folytatni azért, hogy továbbfejlesszük az előzőekben bemutatott ötleteket. Ezeket tárgyaljuk ebben a részben.

Mint azt a 2. részben megjegyeztük, az általunk bemutatott determinisztikus mikro-makro algoritmushoz szükséges számítási idő legnagyobb részét az FP-egyenlet konfigurációs térbeli részének megoldása viszi el. Ezért megközelítésünk hatásfokának növelése érdekében szeretnénk az eljárás ezen részének optimalizálására koncentrálni. A [32] és [29] munkákat követve, erre egy lehetőség a stabilizált ritkított végeselem módszerek használata lenne. Ritkított végeselem módszerek esetében az approximációelméleti eredmények (ld. [7] és [29]) azt mutatják, hogy e módszerek lehetőséget nyújtanak egy bizonyos pontossági szint elérésére kisebb szabadságfok mellett, mint teljes szorzatháló esetén, bár ekkor szigorúbb simasági feltételekre van szükség. További előny, hogy a szabadságfok csökkenése nő a térháló dimenziójának növekedésével. Amennyiben ritkított térhálók alkalmazása lehetővé teszi a konfigurációs térbeli szabadságfok csökkentését, akkor ez jelentős megtakarítást jelent, mivel nemcsak, hogy csökkentjük minden egyes konfigurációs térbeli frissítésnél a feladat méretét, de csökkentjük a szükséges fizikai térbeli megoldás keresések számát is.

Egy másik fontos kérdés, hogy kersztülvihető-e determinisztikus megközelítést használnunk olyan modellek esetében, ahol a konfigurációs tér dimenziója több mint három – mint például a Rouse–Zimm-lánc polimer modellen alapulóknál. Az a véleményünk, hogy ritkított térhálók alkalmazása ezt lehetővé teszi. Valóban, [11]-ben számításokat végeztek, éppen ezt a megközelítést használva, olyan egyszerű homogén nyíróáramlás esetén, ahol a konfigurációs tér dimenziója a hatot is elérte. A leközölt eredmények alapján úgy tűnik, hogy ritkított térhálók alkalmazása jelentősen növeli a hatásfokot a teljes tenzorszorzat háló használatához képest. Ritkított térhálók alkalmazása golyó-rugó típusú polimerlánc modellek esetén egy olyan érdekes téma, amit meg szeretnénk vizsgálni további munkánk során.

Kutatásaink egy másik fontos iránya algoritmusunk matematikai elemzésének finomítása. Egy dolog, amit tisztázni kell, az az operátor felbontás utáni FP-egyenlet gyenge formájának felírásakor használt függvényterek megválasztása. A 2. részben a függvénytereket K -val és M -mel jelöltük és semmit sem mondtunk ezek struktúrájáról. Ezen kívül szeretnénk a determinisztikus algoritmus konvergenciájával is foglalkozni. Lozinski és munkatársai (például [8, 9, 23]-ben) az általuk tárgyalt determinisztikus megközelítés esetében megfigyelték, hogy a megoldás konvergál a térháló finomításával. Szeretnénk ezt a kérdést nagyobb matematikai szigorral megvizsgálni. Ilyen irányú kutatásainkat a [19] munkánk összegezi.

Szándékunkban áll még kielemezni, milyen hatással bír $\psi(\underline{x}, \cdot, t)$ pontossága a releváns makroszkopikus mennyiségekre. Mivel a ψ függvényt a $\underline{q}$ változó szerint átlagoljuk ahhoz, hogy kiszámítsuk $\underline{q}$ -t, valószínű, hogy ψ pontossága $\underline{q}$ -ra nézve kevésbé fontos, mint $\underline{x}$ -re és t -re nézve. Amennyiben sikerül kidolgoznunk a mikroszkopikus és makroszkopikus változók diszkretizációjainak (esetleg adaptív) finomításai közötti pontos összefüggést, akkor lehetővé válna a számításhoz szükséges eszközök és erőforrások (pl. idő, tárhely) hatékonyabb beosztása.

Jelen cikkünkben megvizsgáltunk egy, oldott polimer-folyadékok dinamikáját leíró, többskálájú Navier–Stokes Fokker–Planck-modell numerikus megoldására javasolt végeselem alapú módszert. Bemutattunk néhány számítási eredményt azért, hogy módszerünk hatékonyságát demonstráljuk. A fentebb röviden tárgyalt további kutatási tervek megvalósításakor szándékunkban áll a determinisztikus megközelítés maximális kihasználása azért, hogy lássuk, felveszi-e a versenyt az eddig kidolgozott sztochasztikus módszerekkel a különféle polimer-folyadékok modellezésében.

Hivatkozások

- [1] BARRETT, J.W. AND SCHWAB, CH. AND SÜLI, E.: *Existence of global weak solutions for some polymeric flow models*, Math. Models and Methods in Applied Sciences **15**, 3 (2005), 939–983.
- [2] BARRETT, J.W. AND SÜLI, E.: *Existence of global weak solutions to some regularized kinetic models of dilute polymers*, SIAM J. Multiscale Modeling and Simulation **6**, 2 (2007), 506–546, To appear.
- [3] BILLER, P. AND PETRUCCIONE, F.: *The flow of dilute polymer solutions in confined geometries: a consistent numerical approach*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **25**, (1987), 347–364.
- [4] BIRD, R.B. AND CURTISS, C.F. AND ARMSTRONG, R.C AND HASSAGER, O.: *Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 1, Fluid Mechanics*, second ed., John Wiley and Sons, (1987).
- [5] BIRD, R.B. AND CURTISS, C.F. AND ARMSTRONG, R.C AND HASSAGER, O.: *Dynamics of Polymeric Liquids, Volume 2, Kinetic Theory*, second ed., John Wiley and Sons, (1987).
- [6] BRENNER, S.C. AND SCOTT, L.R.: *The Mathematical Theory of Finite Element Methods*, second ed., Springer (2002).

- [7] BUNGARTZ, H.J. AND GRIEBEL, M.: *Sparse Grids*, Acta Numerica (2004), 1–123.
- [8] CHAUVIÈRE, C. AND LOZINSKI, A.: *Simulation of complex viscoelastic flows using Fokker-Planck equation: 3D FENE model*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **122**, (2004), 201–214.
- [9] CHAUVIÈRE, C. AND LOZINSKI, A.: *Simulation of dilute polymer solutions using a Fokker-Planck equation*, Computers and Fluids **33**, (2004), 687–696.
- [10] CHAUVIÈRE, C. AND OWENS, R.G.: *A new spectral element method for the reliable computation of viscoelastic flow*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. **190**, (2001), 3999–4018.
- [11] DELAUNAY, P. AND LOZINSKI, A. AND OWENS, R.G.: *Sparse tensor-product Fokker-Planck-based methods for nonlinear bead-spring chain models of dilute polymer solutions*, CRM Proceedings and Lecture Notes, (2006), Preprint.
- [12] FAN, X.J.: *Viscosity, first normal stress coefficient and molecular stretching in dilute polymer solutions*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **17**, (1985), 125–144.
- [13] FAN, X.J.: *Molecular models and flow calculations: II. Simulation of steady planar flow*, Acta Mechanica Sinica **5**, (1989), 216–226.
- [14] GROSSO, M. AND MAFFETTONE, P.L. AND HALIN, P. AND KEUNINGS, R. AND LEGAT, V.: *Flow of nematic polymers in eccentric cylinder geometry: influence of closure approximations*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **94**, (2000), 119–134.
- [15] HALIN, P. AND LIELENS, G. AND KEUNINGS, R. AND LEGAT, V.: *The Lagrangian particle method for macroscopic and micro-macro viscoelastic flow computations*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **79**, (1998), 387–403.
- [16] HULSEN, M.A. AND VAN HEEL, A.P.G. AND VAN DEN BRULE, B.H.A.A.: *Simulation of viscoelastic flows using Brownian configuration fields*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **70**, (1997), 79–101.
- [17] KEUNINGS, R.: *A survey of computational rheology*, XIIIth International Congress on Rheology, (Cambridge, UK, August 2000), Available at <http://www.mate.tue.nl/~hulsen>.
- [18] KEUNINGS, R.: *Micro-Macro Methods for the Multiscale Simulation of Viscoelastic Flow Using Molecular Models of Kinetic Theory*, Rheology Review (2004), 67–98.
- [19] KNEZEVIC, D. AND SÜLI, E.: *Spectral Galerkin approximation of Fokker-Planck equations with unbounded drift*, Oxford University Computing Laboratory, Wolfson Building, Parks Road, Oxford OX1 3QD, Numerical Analysis Technical Report Series, 2007/16, (2007).
- [20] KRAMERS, H.A.: *The viscosity of macromolecules in a streaming fluid*, Physica **11**, 1 (1944), .
- [21] LASO, M. AND ÖTTINGER, H.C.: *Calculation of viscoelastic flow using molecular models: the CONNFESSIT approach*, J. Non-Newtonian Fluid Mech. **47**, (1993), 1–20.
- [22] LOZINSKI, A.: *Spectral methods for kinetic theory models of viscoelastic fluids*, École Polytechnique Fédérale de Lausanne, (2003).
- [23] LOZINSKI, A. AND CHAUVIÈRE: *A fast solver for Fokker-Planck equation applied to viscoelastic flows calculation: 2D FENE model*, Journal of Computational Physics **189**, (2003), 607–625.
- [24] LOZINSKI, A. AND CHAUVIÈRE, C. AND FANG, J. AND OWENS, R.G.: *Fokker-Planck simulations of fast flows of melts and concentrated polymer solutions in complex geometries*, J. Rheology **47**, (2003), 535–561.

- [25] NAYAK, R.: *Molecular simulation of liquid crystal polymer flow: a wavelet-finite element analysis*, MIT (1998).
- [26] OLDROYD, J.G.: *On the formulation of rheological equations of state*, Proc. Roy. Soc. London **A200**, (1950), 523–541.
- [27] ÖTTINGER, H.C.: *Stochastic processes in polymeric fluids*, Springer, (1996).
- [28] ROUSE, P.E.: *A theory of the linear viscoelastic properties of dilute solutions of coiling polymers*, J. Chem. Phys. **21**, (1953), 1272–1280.
- [29] SCHWAB, C. AND SÜLI, E. AND TODOR, R.-A.: *Sparse finite element approximation of high-dimensional transport-dominated diffusion problems*, Oxford University Computing Laboratory, Wolfson Building, Parks Road, Oxford OX1 3QD, Numerical Analysis Technical Report Series 2007/4, (2007), .
- [30] SHEWCHUK, J. R.: *Delaunay refinement algorithms for triangular mesh generation*, Computational Geometry: Theory and Applications **22**, (2002), 21–74.
- [31] STEWART, W.E. AND SØRENSEN, J.P.: *Hydrodynamic interaction effects in rigid dumbbell suspensions: II. Computations for steady shear flow*, Trans. Soc. Rheol. **16**, (1972), 1–13.
- [32] SÜLI, E.: *Finite element approximation of high-dimensional transport-dominated diffusion problems*, Oxford University Computing Laboratory, NA-05/19, (2005).
- [33] WARNER, H.R.: *Kinetic Theory and Rheology of Dilute Suspensions of Finitely Extendible Dumbbells*, Ind. Eng. Chem. Fundamentals, (1972), 379–387.
- [34] ZIMM, B.H.: *Dynamics of polymer molecules in dilute solution: viscoelasticity, flow birefringence and dielectric loss*, J. Chem. Phys. **24**, (1956), 269–278.

DAVID KNEZEVIC

Oxford University Computing Laboratory
 Wolfson Building, Parks Road
 Oxford OX1 3QD, U.K.

SÜLI ENDRE

Oxford University Computing Laboratory
 Wolfson Building, Parks Road
 Oxford OX1 3QD, U.K.
 Endre.Suli@comlab.ox.ac.uk

FINITE ELEMENT METHODS FOR DETERMINISTIC SIMULATION OF POLYMERIC FLUIDS

DAVID KNEZEVIC, EDRE SÜLI

In this work we consider a finite element approach to solving the coupled Navier-Stokes (NS) and Fokker-Planck (FP) multiscale model that describes the dynamics of dilute polymeric fluids.

Deterministic approaches such as ours have not received much attention in the literature because they present a formidable computational challenge due to the fact that the analytical solution of the Fokker-Planck equation may be a function of a large number of independent variables. For instance, to simulate a 3-dimensional flow using the dumbbell model for polymers one must solve the coupled NS-FP system in which the Fokker-Planck equation is posed in a 6-dimensional domain. First we discuss the physical and mathematical foundations of the NS-FP model, then we develop our deterministic finite element based approach in detail. Numerical results, obtained using parallel computation, are presented to demonstrate the efficacy of our approach.