

УДК.533.72.

ЭВОЛЮЦИЯ ПОЛУОГРАНИЧЕННОГО НЕСТАЦИОНАРНОГО ПЛОСКОГО ГАЗОПОДОБНОГО ОБЛАКА

А.Н. Голов

*Московский Государственный Областной университет
105005, Москва, ул. Радио, 10а*

Аннотация. Рассмотрена эволюция нестационарного широкого газоподобного облака в полупространстве. Получены аналитические выражения статистических распределений и плотности облака. Дан анализ и графическое представление полученных формул.

Ключевые слова: кинетическая теория, нестационарный газ.

1. Целью данной работы является теоретическое исследование процесса расширения нестационарного газоподобного облака в полуограниченный объём. Подобные явления наблюдаются, например, при испарении, возгонке или быстром диспергировании слоёв конденсированного вещества, нанесённых на непроницаемую подложку, вследствие чего в полупространстве образуется нестационарное облако частиц. Подобные явления широко распространены в природе, а также происходят в ряде технических процессов [1 – 3]. Нестационарные процессы в таких системах, в т. ч., в связи с облучением тел лазерными импульсами рассматривались в [4, 5] и др. Ввиду сказанного, их исследование имеет как теоретический, так и практический интерес. Применимость гидродинамического описания подобных процессов значительно ограничивается условием постоянства плотности среды и сложностью включения в теорию тепловых явлений. Использование газодинамики и неравновесной термодинамики не даёт возможности учесть микроскопическое строение среды, свойства и движение её частиц. Более широк и перспективен подход, исходящий из представлений статистической газодинамики [6]. К подобным задачам применяется также комбинированный подход, основанный на решении уравнения Больцмана в прилегающем к поверхности слое Кнудсена и использовании методов газодинамики за пределами этого слоя [7 и др.] Однако, представляется желательным такое рассмотрение данного процесса, которое, исходя из микроскопической теории, позволяло бы дать и кинетическое описание его в представлении квазинепрерывной среды, включая эволюцию плотности во времени и пространстве.

2. Далее мы исходим из микроскопической неравновесной статистической теории, на основе которой разработанными методами можно дать кинетическое описание рассматриваемых процессов. Рассмотрим нестационарную газоподобную систему N частиц, образованную весьма быстрым разрушением плоского слоя конденсированного вещества в вакууме, причём его подложка (далее – стенка) сохраняется и является непроницаемой. С микроскопической точки зрения стенка является бесконечно толстым и высоким потенциальным барьером, созданным силами отталкивания. Пусть исходный слой имеет массу M и толщину L . Площадь слоя S считается столь большой, что для характерных интегралов Пуассона в его плоскости XY пределы можно принять бесконечными с достаточно хорошим приближением. Т. о., краевые эффекты не рас-

считаются. Слой принят однородным, объёмом $V_0 = S \cdot L$, так что его объёмная плотность ρ_0 и масса на единицу поверхности σ_0 – константы, и при формальном пределе $S \rightarrow \infty$ одновременно $M \rightarrow \infty$. Пусть в начальный момент $t = 0$ происходит весьма быстрое разрушение слоя вследствие некоторого воздействия (например, кратковременного импульса электрического тока, акустического импульса и др.). Будем считать это воздействие однородным в плоскости XY. В результате разрушения структурных связей и расширения вещество превращается в газоподобную систему (облако), которая может состоять как из атомарных (молекулярных), так и из более крупных дисперсных частиц. Далее считаем все образовавшиеся частицы однородными и бесструктурными, массы m . Поскольку межчастичные силы – короткодействующие, а с расширением облака быстро уменьшается его плотность, полагаем в дальнейшей эволюции частицы не взаимодействующими, иначе как через упругие столкновения, пренебрегая диссипацией энергии и возбуждением внутренних степеней свободы частиц. Внешние поля отсутствуют, но система не является изолированной, т. к. облако находится в контакте со стенкой. Столкновения частиц со стенкой и между собой считаем упругими.

3. Поставим задачу описания эволюции образовавшегося облака на основе микроскопической теории. Примем за исходное нестационарное уравнение Лиувилля – Гиббса (УЛГ), позволяющее распространить метод Гиббса на неравновесные состояния [8]. При переходе к кинетическому описанию мы основываемся на представлениях кинетической теории Н. Н. Боголюбова [9, 10].

Для многочастичной функции распределения в облаке $F_N(q_i, p_i, t)$ ($i = 1 \dots s$) имеем нестационарное УЛГ:

$$\partial_t F_N + \hat{L} F_N = 0. \quad (1)$$

(\hat{L} – стационарный лиувиллиан, здесь и далее $p_i = m \cdot \dot{q}_i$). При отыскании его решения используем метод интегралов однородного лиувиллиана (интолов) [8] (применительно к сходной задаче см. также [11]), ограничиваясь рассмотрением квазигиббсовых решений. В отличие от статьи [11] здесь добавим в интол импульса константу, что соответствует допущению ненулевой массовой начальной скорости облака v_0 , (что эквивалентно рассмотрению процесса в движущейся системе отсчёта). Основная квадратичная форма η , также удовлетворяющая уравнению вида (1) ищется, как функционал интолов. Учитывая, что задача не симметрична относительно стенки, мы допускаем наличие в η линейных по интолам членов, так что эта форма имеет более общий вид:

$$\eta = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^2 \left[a \cdot p_{i\alpha}^2 + b \cdot \left(q_{i\alpha} - \frac{p_{i\alpha} t}{m} \right)^2 - c \cdot p_{i\alpha} \left(q_{i\alpha} - \frac{p_{i\alpha} t}{m} \right) \right] + \sum_{i=1}^N \left[a \cdot (p_{i3} - p_3)^2 + b \cdot \left(q_{i3} - \frac{p_{i3} t}{m} \right)^2 - c \cdot (p_{i3} - p_3) \cdot \left(q_{i3} - \frac{p_{i3} t}{m} \right) + g_3 \cdot (p_{i3} - p_3) + h_3 \cdot \left(q_{i3} - \frac{p_{i3} t}{m} \right) \right]. \quad (2)$$

Здесь (и далее) латинские индексы нумеруют частицы, греческие – степени свободы, причём индекс $\alpha=3$ означает координату, по которой направлен дополнительно вводимый постоянный импульс. a, b, c – константы задачи, как в [11], определяемые из

дополнительных условий; g_3, h_3 - дополнительные константы, появляющиеся в связи с линейными по интолам членами. Константы вводятся так, чтобы выражение (2) было безразмерно, и приняты равными для всех однородных частиц. Это выражение автоматически удовлетворяет уравнению (1), которому удовлетворяет и любой функционал (2). Плотность вероятности ищем в виде такого функционала в квазигиббсовоой форме:

$$F_N = \exp(-\eta),$$

где в показатель можно добавить аддитивную безразмерную константу, что эквивалентно умножению экспоненты на постоянный множитель F_0 . Искомое решение должно удовлетворять стандартным требованиям действительности, неотрицательности, нормируемости и граничным условиям обращения в нуль на бесконечно удалённых границах фазового объёма и на стенке. Первые два требования удовлетворяются, когда введённые константы действительны и неотрицательны (при действительных фазовых переменных) и действительное $F_0 > 0$. Выполнение граничных условий на бесконечности обеспечивается знаком минус в показателе экспоненты. Условие нормировки используем в стандартной форме. Аннулирование функционала на стенке обеспечивается умножением функционала на многомерную функцию Хевисайда, исключаящую область отрицательных значений координат (далее не пишется для компактности формул, но имеется в виду). Это соответствует такому выбору координат, при котором расширение системы происходит в положительное полупространство.

Тогда для принятой модели плотность вероятности имеет вид:

$$F_N = Z_N^{-1} \cdot \exp(-\eta). \quad (3)$$

Для последующих вычислений и более компактной записи формул удобно представить:

$$\eta = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha=1}^2 [k_1 \cdot p_{i\alpha}^2 - k_3 \cdot p_{i\alpha} q_{i\alpha} + b \cdot q_{i\alpha}^2] + \sum_{i=1}^N [k_1 \cdot p_{i3}^2 + k_2 \cdot p_{i3} - k_3 \cdot p_{i3} q_{i3} + k_4 \cdot q_{i3} + b \cdot q_{i3}^2 + k_5], \text{ где:} \quad (4)$$

где

$$\begin{aligned} k_1 &= a + ct / m + bt^2 / m^2; \\ k_2 &= g_3 - 2ap_3 - (h_3 + cp_3) \cdot t / m; \\ k_3 &= -c - 2bt / m; \\ k_4 &= h_3 + cp_3; \\ k_5 &= ap_3^2 - g_3 p_3; \end{aligned} \quad (5)$$

каковые выражения и представляются в (3). При этом статистический интеграл:

$$Z_N = (Z_1 \cdot Z_2 \cdot Z_3)^N, \quad (6)$$

где: Z_1 и Z_2 – определяются нормировкой в плоскости XY и те же, что в [8], а Z_3 :

$$Z_3 = \frac{\pi \cdot \exp(C - B^2 / 4A) \cdot [1 + \operatorname{erf}(B / 2\sqrt{-A})]}{2\sqrt{abw}}. \quad (7)$$

Здесь обозначено:

$$\begin{aligned} w &= 1 - c^2 / 4ab; \\ A &= -b + k_3^2 / 4k_1; \\ B &= -k_4 + k_2k_3 / 2k_1; \\ C &= -k_5 + k_2^2 / 4k_1. \end{aligned} \quad (8)$$

Таким образом, Z_N – сложная функция времени, изменяющаяся, как показывает исследование, в конечных пределах. Тогда плотность вероятности приводится к виду:

$$F_N = \prod_{i=1}^N \prod_{\alpha=1}^3 F_{i\alpha}. \quad (9)$$

Причём F_{i1}, F_{i2} – те же, что в [8], а

$$F_{i3} = Z_3^{-1} \cdot \exp(-\eta_{i3}), \quad (10)$$

где (см. (3) и (4)):

$$\eta_{i3} = [k_1 \cdot p_{i3}^2 + k_2 \cdot p_{i3} - k_3 \cdot p_{i3}q_{i3} + k_4 \cdot q_{i3} + b \cdot q_{i3}^2 + k_5]. \quad (11)$$

Функции вида (3) и (9) при устранении ограничений, создаваемых непроницаемой стенкой, переходят в функции, найденные в [8, 11].

4. Найденные распределения вида (3) и (9) содержат в показателях члены, описывающие корреляцию переменных q_i и p_i . Поэтому они не представляются произведением функций импульсов и координат. Эти последние найдём, интегрируя исходное распределение по сопряжённым переменным. При этом распределения по импульсам p_x, p_y те же, что получены и исследованы в [8]. 1-частичное распределение по импульсу p_z (для любого i ; значок z справа здесь и далее опускаем):

$$F_1(p_z) = \frac{\sqrt{aw} \cdot \exp[-aw \cdot (p - P_t)^2] \cdot [1 + \operatorname{erf}(\mu p + v)]}{\sqrt{\pi} \cdot \left[1 + \operatorname{erf}\left(\frac{(\mu P_t + v)}{\sqrt{1 + \mu^2 / aw}}\right) \right]}. \quad (12)$$

Здесь:

$$P_t = \frac{k_3 k_4 - 2bk_2}{4abw}; \quad (13)$$

$$\mu = -k_3 / 2\sqrt{b}; \quad \nu = -k_4 / 2\sqrt{b}. \quad (14)$$

Из (12) следует, что средняя кинетическая энергия движения частиц по OZ не равна средней кинетической энергии их движения по осям OX и OY. Т. о., в рассматриваемом процессе можно говорить о продольной и поперечной температуре [12].

Распределения по координатам q_x , q_y те же, что получены и исследованы в [8]. 1-частичное распределение по q_z :

$$F_1(q_z) = \frac{2\sqrt{bw} \cdot \exp[-bw \cdot (q_z - Q_t)^2 / u]}{\sqrt{\pi u} \cdot [1 + \operatorname{erf}(\sqrt{bw/u} \cdot Q_t)]}, \quad (15)$$

где обозначено: $u = l + ct/am + bt^2/am^2$; и

$$Q_t = \frac{(4abwp_3 - c \cdot h_3 - 2bg_3) \cdot t - 2amh_3 - cmg_3}{4mabw}. \quad (16)$$

5. Приняв далее

$$q = q_0 + q_t, \quad (17)$$

где q_0 – начальное значение координаты, а q_t – текущее приращение её, можем рассматривать (15) как совместное распределение по q_0 и q_t (см. [13, 14]). При этом

$$q_0 \in [0, L]; \quad q_t \in [-q_0, \infty],$$

Интегрируя (15) (с подстановкой (17)) по q_t (и положив $t=0$), найдём координатное распределение в начальном состоянии, а интегрируя его по q_0 – найдём координатное распределение в текущем состоянии (Эти промежуточные формулы не приводятся). Тогда по обычной рецептуре кинетической теории [10], при помощи взаимных интегральных преобразований (см. [15, 16]) находим начальную и текущую плотности среды. Требуем сохранения массы, так что масса квазинепрерывного облака в полуобъёме в любой текущий момент t равна массе исходного слоя. Из этого требования вытекает дополнительная нормировка плотности на массу при двойном интегрировании по обоим переменным, которая не тривиальна и зависит от порядка интегрирования, т. к. интервал изменения q_t зависит от значения q_0 (вследствие чего из соображений размерности возникают дополнительные нормировочные множители). Это следует учитывать при дальнейшей работе со средними значениями кинетических операторов. Начальная плотность при $t=0$ (обозначения те же, что в [11]):

$$\langle \rho \rangle = \rho_0 \cdot \ddot{A}(z_0, 0, L); \quad (\rho_0 = Nm / V_0); \quad (18)$$

где $\ddot{D}(z_0, 0, L)$ – функция Терлецкого [17], равная 1 при z_0 в исходном слое и 0 – вне его. Текущая плотность среды:

$$|\rho\rangle = \frac{\rho_0 \cdot \varphi(x, y) \cdot \sqrt{\pi\beta} L \cdot \left\{ \Phi \left[\sqrt{\beta} \cdot (Q_t - z) \right] - \Phi \left[\sqrt{\beta} \cdot (Q_t - z - L) \right] \right\}}{\left\{ \sqrt{\pi\beta} L + \exp \left[-\beta (Q_t + L)^2 \right] - \exp \left[-\beta Q_t^2 \right] + \sqrt{\pi\beta} \cdot \left[(Q_t + L) \cdot \Phi \left[\sqrt{\beta} (Q_t + L) \right] - Q_t \cdot \Phi \left(\sqrt{\beta} \cdot Q_t \right) \right] \right\}} \quad (19)$$

Здесь x, y, z – координаты точки в физическом пространстве, $\varphi(x, y)$ – функция координат x, y , найденная в [11], $\beta = bw/u$, $\Phi(\xi)$ – интеграл вероятности. Потребуем, чтобы единственный максимум функции (19) при $t=0$ находился на стенке (когда $z = -L$). Из этого требования уточняется введённая ранее (см. (2)) константа h_3 . Тогда:

$$Q_t = \frac{(4ap_3 - c \cdot L - 2g_3) \cdot t}{4am} - \frac{L}{2} \quad (20)$$

с условием скорости движения максимума прочь от стенки:

$$(4ap_3 - c \cdot L - 2g_3) \geq 0. \quad (21)$$

Соответственно уточняются все уравнения, содержащие h_3 , в т. ч. (12), (13) и (15).

6. Здесь мы не будем рассматривать задачу полного определения неопределённых констант и параметров. Эта задача требует отдельного исследования с привлечением дополнительных граничных условий (см. [8]), и подробное изложение её не включено в данную статью по соображениям объёма. В дальнейшем для графического представления формул мы условно примем $a=b=c=1$, что, в сущности, соответствует выбору специальной СЕ. При этом $w=3/4$. С учётом условия (21), и исходя из удобства масштабирования, выбраны значения прочих параметров, указанные в подписях к рисункам. На рис. 1, 2 показана эволюция со временем импульсного распределения (12). На рис. 1 даны профили распределения в последовательные моменты времени. Начальная асимметрия распределения относительно нуля вызвана начальным движением слоя со скоростью v_0 . Примечательной особенностью задачи является уменьшение доли частиц со значениями $p_z < 0$ (при сохранении нормы). В асимптотике по t все частицы имеют $p_z \geq 0$.

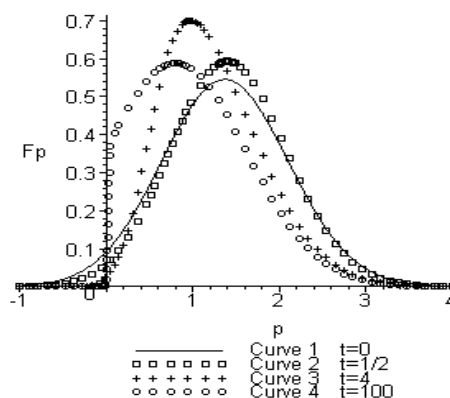


Рис. 1. Профиль распределения по p_z (12) в разные моменты t . [$m=2, g_3=1, h_3=1, p_3 = 6/5$]

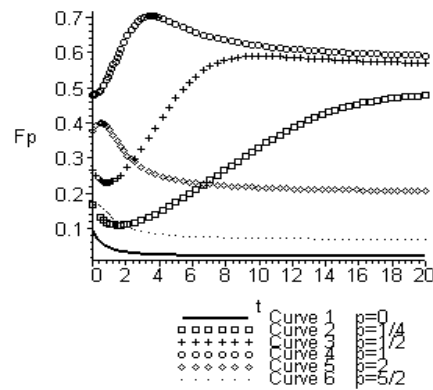


Рис.2. Зависимость распределения (12) от времени для частиц с разными значениями p_z . (Значения параметров те же, что на рис. 1).

Эволюция текущей плотности, описываемой формулой (19), показана на рис.3, 4.

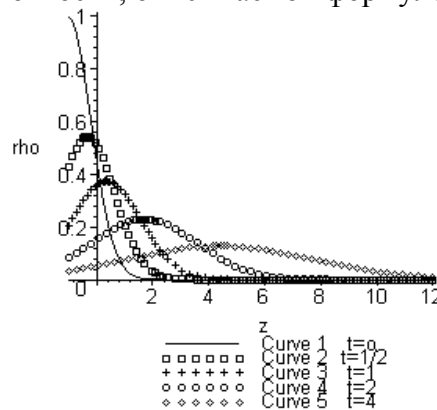


Рис. 3. Профиль текущей плотности (19) в разные моменты времени t . [$a=1, b=1, c=0.6, m=1, w=0.9, g_3=1, p_3=2, L=1, N=1$] (m и N – в условных единицах, так что $\rho_0=1$)

На рис. 3 даны профили текущей плотности в последовательные моменты времени, причём плотность нормирована на полную массу облака $m \cdot N$ (при построении условно принято $m \cdot N = 1$). Поскольку зависимость от x, y нас не интересует, используем выражение (19), делённое на $\varphi(x, y)$. Видно движение максимума плотности прочь от стенки с одновременным расплыванием облака в полуобъёме (дисперсия плотности возрастает). Значение $z = -1$ соответствует непроницаемой стенке. При построении графиков принято дополнительное условие равенства текущей плотности в момент нуль и начальной плотности слоя. Это условие приводит к трансцендентному уравнению:

$$2\Phi\left(L \cdot \sqrt{bw} / 2\right) = 1, \quad (22)$$

из которого при заданных b и L находим численным решением w и, далее, константу c . Эти численные значения использованы при построении графиков на рис. 3, 4.

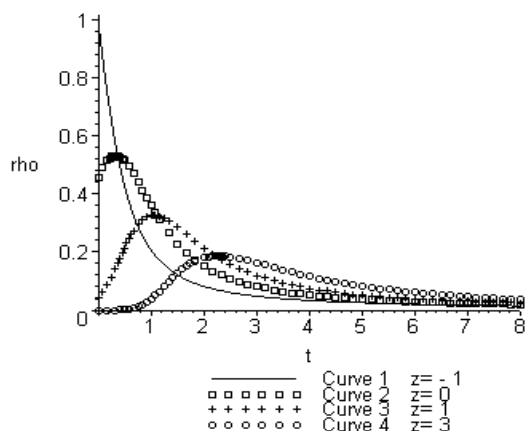


Рис.4. Зависимость текущей плотности (19) от времени t для разных значений текущей координаты z_t . (Значения параметров те же, что на рис. 3).

На рис.4 показано перераспределение частиц в пространстве со временем при разных значениях z . Видно, что на первом этапе эволюции происходит сравнительно быстрое выравнивание плотности в области, близкой к стенке, а затем долгая медленная релаксация её к бесконечно малому асимптотическому значению. Для неотрицательных z предсказывается прохождение максимума плотности.

7. Представляет интерес сравнение графиков с разными m . Профили импульсного распределения и плотности облака приведены на рис. 5 и 6. Эти профили построены для $m = 100$. Значения прочих параметров те же, что на соответствующих рис.1 и 3.

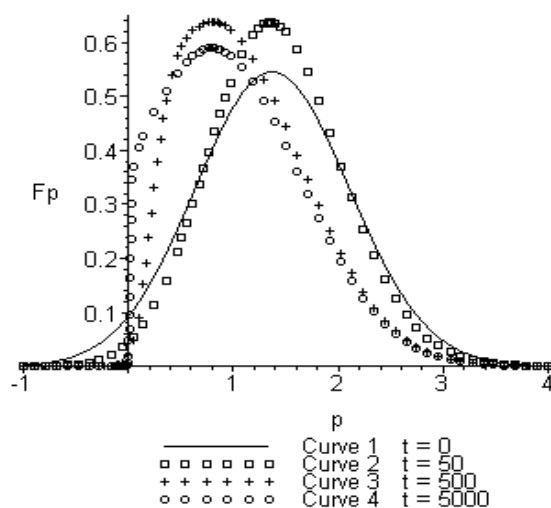


Рис. 5. Профиль распределения по z -проекции импульса (12) в разные моменты t . [$m=100, g_3=1, h_3=1, p_3=6/5$]

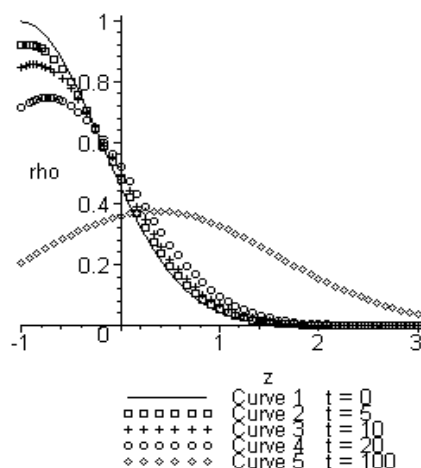


Рис.6. Профиль текущей плотности (19) в разные моменты t .
 (m и N в условных единицах, так что $\rho_0=1$)
 $[a=1, b=1, c=0.6, m=100, w=0.9, g_3=1, p_3=2, L=1, N=1/100]$

Из сравнения рис.5 с рис.1 видно, что характер эволюции импульсного распределения сохраняется, но сильно замедляется её темп. Время приближения распределения к асимптотическому (с исключением отрицательных значений p_z) возрастает почти на 2 порядка. Сходную картину показывает и рис. 6 (сравни с рис. 3). Как и для импульсного распределения, характер эволюции сохраняется, но её темп замедляется почти на 2 порядка. Вплоть до $t \sim 100$, большая часть вещества остаётся в пределах исходного слоя, и максимум плотности не выходит за его внешнюю границу.

Приведённые графики и соответствующие им формулы позволяют прогнозировать, что эволюция облака, состоящего из дисперсных частиц, содержащих $10^6 - 10^{12}$ атомов, протекает на много порядков медленнее, чем молекулярного облака. При образовании подобного облака в результате диспергирования исходного слоя, его вещество будет долго удерживаться вблизи стенки, весьма медленно распространяясь в полуобъём. При образовании смешанного газодисперсного облака прогнозируется весьма быстрое распространение его газовой фазы, после чего у стенки формируется газоподобное облако задержавшихся дисперсных частиц, эволюционирующее практически в вакууме. Это облако почти не взаимодействует уже с удалившимся от него газовым облаком.

8. Из проведённого исследования, помимо предзаданного исключения распространения облака через стенку, следует ряд отличий его эволюции, от модели двустороннего расширения, рассмотренной в [8, 11], вызванных наличием стенки.

- 1) профили плотности не являются монотонно убывающими с удалением от стенки при $z > 0$, но для $t > 0$ образуют максимум, движущийся прочь от стенки, при уменьшении плотности у стенки;
- 2) распределение по импульсам не является максвелловым ни начально и ни при каком $t > 0$, его максимум смещается по сложному закону, и дисперсия не постоянна;
- 3) движение частиц со скоростями, направленными в сторону стенки, асимптотически исключается, и формируется направленное движение облака прочь от стенки.

Автор выражает благодарность сотрудникам кафедры теоретической физики МГОУ за полезное обсуждение.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Петров Ю.И.* Физика малых частиц. «Наука», М., 1982
2. Диспергированные металлические плёнки. // Киев, Ин-т физики АН УССР, 1972.
3. Диспергированные металлические плёнки//Киев, Ин-т проблем материаловедения АН УССР, 1976.
4. *Ч. Дж. Найт.* Нестационарное испарение в переходном режиме с поверхности в вакуум. *Аэрокосмическая техника*, Т.1, 7 2, 83 – 89, 1983.
5. *Анисимов С.И., Рахматулина А. Х.* Динамика расширения пара при испарении в вакуум. *ЖЭТФ*, т.64, вып. 3, 1973.
6. *Рудяк В.Я.* Статистическая аэрогидромеханика гомогенных и гетерогенных сред. Т. 1. Кинетическая теория. Новосибирск: Наука, 2004. 320 с.
7. *Яламов Ю.И., Галоян В.С.* Динамика капель в неоднородных вязких средах.//Луйс, Ереван, 1985
8. *Голов, А.Н., Яламов, Ю.И.* Статистическая и кинетическая теория нестационарных газоподобных и газодисперсных систем/ А. Н. Голов, Ю. И. Яламов. - М.: изд. МГОУ. 2011, - 230 с.
9. *Боголюбов Н.Н.* // Проблемы динамической теории в статистической физике. – М., Гостехиздат, 1946. 290 с.
10. *Гуров К.П.* Основания кинетической теории. – 351 с. «Наука», М.,1966.
11. *Яламов Ю.И., Голов А.Н.* Эволюция облака, созданного быстрым распылением широкой пластины в вакууме. – Труды Центра фундаментальных научных исследований МГОУ, 7 1, М., Издательство МГОУ, 2005, с. 15 – 26.
12. *Бёрд Г.* Молекулярная газовая динамика. М.: «Мир», 1981, 320 с.
13. *Прохоров Ю.В., Розанов Ю.А.* Теория вероятностей. – «Наука», М., 1973
14. *Ротт Л.А.* Статистическая теория молекулярных систем. М.: «Наука».1979.280с.
15. *Голов А.Н.* Учёт начального состояния в нестационарном решении уравнения Лиувилля для свободно расширяющегося газа. - 8 с., ВИНТИ 73303-В95, М., МПУ, 1995.
16. *Голов А.Н.* Нахождение полей плотности, образуемых диспергированием протяжённых тел в вакууме. – 7 с., - ВИНТИ 7 121 - В2002, М., МПУ, 2002.
17. *Терлецкий Я.П.* Статистическая физика. - 350 с. «Высшая школа», М., 1973.

**THE EVOLUTION OF THE NON-STATIONARY WIDE GAS-LIKED CLOUD
IN A HALF SPACE**

A. Golov

*Moscow State Regional University
10a, Radio st., Moscow, 105005, Russia*

Abstract. The evolution of the non-stationary wide gas-like cloud, expanded into a half-space, is considered. The analytical formulae of the statistical functions of distributions and density of the cloud are obtained. The analysis and graphical presentation of the obtained formulae are performed.

Keywords: kinetics, kinetic theory, non-stationary gas.