Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. Н. Васильев, Расчет профиля плотности многокомпонентной жидкости с геометрией плоского слоя, *ТМФ*, 2007, том 151, номер 1, 149–154

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6017>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.219.149

26 апреля 2023 г., 02:51:11

© 2007 г.

А. Н. Васильев*

РАСЧЕТ ПРОФИЛЯ ПЛОТНОСТИ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ ЖИДКОСТИ С ГЕОМЕТРИЕЙ ПЛОСКОГО СЛОЯ

Исследуется многокомпонентная жидкая система с пространственным ограничением в форме плоского параллельного слоя. Для такой системы в приближении плавной неоднородности в общем виде рассчитывается профиль распределения плотности различных компонент системы при условии, что перпендикулярно к плоскости слоя действует внешнее поле. Отдельно рассматривается случай гравитационного поля.

Ключевые слова: многокомпонентная система, плотность, пространственное ограничение, гравитационное поле.

1. ВВЕДЕНИЕ

Несмотря на существенные успехи в физике жидкого состояния, достигнутые в последнее время, ряд практически важных задач остается нерешенным. Среди них проблема расчета профилей плотности жидких смесей при наличии внешнего поля. Задача решена в наиболее простом случае для простых (однокомпонентных) жидкостей для пространственно ограниченных систем различных геометрий [1], [2], однако для общего случая системы, состоящей из произвольного числа компонент, она не рассматривалась. В данной работе предлагается подход, который позволяет решить эту задачу. По своей сути он является синтезом идей, положенных в основу методов расчета парных корреляций в многокомпонентных системах [3] и расчета профиля плотности в однокомпонентных жидкостях [1], [2].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Свободная энергия Φ жидкой системы, состоящей из N компонент, может быть представлена в виде

$$\Phi = \int \left(\Phi_0(\{\rho_i\}, \{\nabla \rho_i\}) + \sum_{i=1}^N h_i(\vec{r}) \rho_i(\vec{r}) \right) dV, \quad (1)$$

*Киевский национальный университет, Киев, Украина. E-mail: vasilev@univ.kiev.ua

где через ρ_i ($i = 1, 2, \dots, N$) обозначены плотности компонент системы, Φ_0 является плотностью свободной энергии при отсутствии внешнего поля, а $h_i(\vec{r})$ есть плотность потенциала поля, действующего на компоненту с соответствующим индексом.

Чтобы решить задачу о распределении плотности компонент смеси, необходимо не только знать явный вид плотности свободной энергии Φ_0 , но и принять во внимание, что общая масса каждой из компонент системы остается постоянной. Эти обстоятельства приводят к тому, что на систему накладываются N дополнительных условий

$$\int \rho_i(\vec{r}) dV = M_i, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad (2)$$

где M_i есть масса компоненты с индексом i .

Распределение плотностей компонент будем искать в приближении плавной неоднородности, понимаемом как плавность профиля отклонения плотности от равномерного распределения. Представим плотности компонент в виде

$$\rho_i(\vec{r}) = \langle \rho_i \rangle + \eta_i(\vec{r}), \quad (3)$$

где $\langle \rho_i \rangle$ есть средняя плотность компоненты, а $\eta_i(\vec{r})$ – отклонение от этой плотности. Условия постоянства массы компонент трансформируются в равенства

$$\int \eta_i(\vec{r}) dV = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (4)$$

Будем полагать величины $\eta_i(\vec{r})$ малыми параметрами и разложим плотность свободной энергии в ряд по этим параметрам до второго порядка включительно:

$$\Phi_0(\{\rho_i\}, \{\nabla \rho_i\}) \simeq \Phi_0(\{\langle \rho_i \rangle\}, \{0\}) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^N (a_{ij} \eta_i \eta_j + b_{ij} \nabla \eta_i \nabla \eta_j), \quad (5)$$

где

$$a_{ij} = \frac{\delta^2 \Phi_0}{\delta \rho_i \delta \rho_j}, \quad (6)$$

а параметры b_{ij} описывают взаимодействие неоднородностей в распределении плотностей компонент [4]. Таким образом, добавка к свободной энергии системы, связанная с отклонением профилей плотности от однородного распределения, равна

$$\delta \Phi = \frac{1}{2} \int \left(\sum_{i,j=1}^N (a_{ij} \eta_i \eta_j + b_{ij} \nabla \eta_i \nabla \eta_j) + 2 \sum_{i=1}^N h_i(\vec{r}) \eta_i \right) dV. \quad (7)$$

Из-за наличия внешнего поля минимум представленного функционала достигается при отличных от нуля значениях параметров η_i . Таким образом, задача сводится к минимизации функционала (7) при условии (4).

3. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ

Сформулированная задача известна как изопериметрическая [5]. Ее решение будем искать методом неопределенных множителей Лагранжа. Рассмотрим систему

с геометрией плоского параллельного слоя толщины L . В силу симметрии задачи (для внешних полей, направленных перпендикулярно к плоскости слоя) отклонения плотности от однородного распределения зависят только от координаты z , отсчитываемой в направлении, перпендикулярном плоскости слоя ($0 \leq z \leq L$). В результате минимизации функционала (7) получаем систему дифференциальных уравнений

$$\sum_{j=1}^N \left(a_{ij} \eta_j - b_{ij} \frac{d^2 \eta_j}{dz^2} \right) = -(\lambda_i + h_i(z)) \quad (8)$$

с граничными условиями

$$\left. \frac{d\eta_i}{dz} \right|_{z=0}^{z=L} = 0; \quad (9)$$

неизвестные множители λ_i выбираются так, чтобы выполнялись дополнительные условия

$$\int_0^L \eta_i(z) dz = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N. \quad (10)$$

Удобнее, однако, представить систему и дополнительные условия в матричном виде

$$\hat{A} \vec{\eta} - \hat{B} \frac{d^2 \vec{\eta}}{dz^2} = -(\vec{\lambda} + \vec{h}(z)), \quad (11)$$

$$\int_0^L \vec{\eta}(z) dz = 0, \quad (12)$$

где матрицы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ формируются из элементов a_{ij} и b_{ij} , соответственно, элементами векторов $\vec{\lambda}$ и $\vec{h}(z)$ являются константы λ_i и поля $h_i(z)$ ($i, j = 1, 2, \dots, N$). Решение зависит от внешнего поля $\vec{h}(z)$, однако для данного типа граничных условий задача может быть существенно упрощена. Легко показать, что при граничных условиях

$$\left. \frac{d\vec{\eta}}{dz} \right|_{z=0}^{z=L} = 0 \quad (13)$$

и при

$$\vec{\lambda} = -\frac{1}{L} \int_0^L \vec{h}(z) dz \quad (14)$$

условие (12) выполняется автоматически. Вектор профиля распределения плотности в этом случае имеет вид

$$\vec{\eta}(z) = \vec{\xi}(z) - \hat{A}^{-1} \vec{\lambda} = \vec{\xi}(z) + \hat{A}^{-1} \int_0^L \frac{\vec{h}(z)}{L} dz, \quad (15)$$

а вектор $\vec{\xi}(z)$ есть решение уравнения

$$\hat{A} \vec{\xi} - \hat{B} \frac{d^2 \vec{\xi}}{dz^2} = -\vec{h}(z) \quad (16)$$

с граничными условиями

$$\left. \frac{d\vec{\xi}}{dz} \right|_{z=0}^{z=L} = 0 \quad (17)$$

без всяких дополнительных ограничений.

Для произвольного поля $\vec{h}(z)$ решение может быть представлено в виде

$$\vec{\xi} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(\hat{B}^{-1} \hat{A} + \frac{\pi^2 n^2}{L^2} \hat{E} \right)^{-1} \hat{B}^{-1} \vec{h}_n \cos\left(\frac{\pi n z}{L}\right), \quad (18)$$

где $\hat{E}$ есть единичная матрица, а

$$\vec{h}_n = \frac{2 - \delta_{0n}}{L} \int_0^L \vec{h}(z) \cos\left(\frac{\pi n z}{L}\right) dz \quad (19)$$

(через δ_{ij} обозначен символ Кронекера). Для практического использования удобно представить матрицу

$$\hat{\Lambda}_n = \left(\hat{B}^{-1} \hat{A} + \frac{\pi^2 n^2}{L^2} \hat{E} \right)^{-1} \quad (20)$$

в виде спектрального разложения по собственным числам κ_m^2 ($m = 1, 2, \dots, N$) матрицы $\hat{B}^{-1} \hat{A}$, а именно

$$\hat{\Lambda}_n = \sum_{m=1}^N \frac{\hat{\alpha}_m}{\kappa_m^2 + \pi^2 n^2 / L^2}, \quad (21)$$

где матрицы спектрального разложения

$$\hat{\alpha}_m = \prod_{i=1, i \neq m}^N \frac{\hat{E} \kappa_i^2 - \hat{B}^{-1} \hat{A}}{\kappa_i^2 - \kappa_m^2}. \quad (22)$$

Таким образом, получаем общее решение задачи о распределении плотности в многокомпонентной жидкой системе с геометрией плоского параллельного слоя во внешнем поле, направленном перпендикулярно к плоскости слоя.

4. ГРАВИТАЦИОННОЕ ПОЛЕ

В ряде практически важных ситуаций решение задачи может быть построено более простым путем. В частности, для случая гравитационного поля $\vec{h}(z) = gz \vec{k}$ ($\vec{k}$ есть N -мерный вектор с единичными элементами) решение уравнения (11), удовлетворяющее граничным условиям, может быть представлено в виде

$$\vec{\eta}(z) = \hat{\gamma}^{-1} \hat{A}^{-1} \text{sh}(\hat{\gamma} L)^{-1} (\text{ch}(\hat{\gamma} z) - \text{ch}(\hat{\gamma}(L - z))) \vec{k} g - \hat{A}^{-1} \vec{\lambda} - gz \hat{A}^{-1} \vec{k}, \quad (23)$$

где $\vec{\lambda} = -\vec{k} g L / 2$ и

$$\hat{\gamma}^2 = \hat{B}^{-1} \hat{A}. \quad (24)$$

Тогда для вектора профиля распределения плотности имеем

$$\vec{\eta}(z) = \left(\hat{\gamma}^{-1} \hat{A}^{-1} \text{sh}(\hat{\gamma} L)^{-1} (\text{ch}(\hat{\gamma} z) - \text{ch}(\hat{\gamma}(L - z))) + \left(\frac{L}{2} - z \right) \hat{A}^{-1} \right) \vec{k} g. \quad (25)$$

У гиперболических функций от матричных аргументов существует несколько представлений. Например, матрица $\text{ch}(\hat{\gamma} z)$ может рассматриваться как ряд

$$\text{ch}(\hat{\gamma} z) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{\hat{\gamma}^{2m} z^{2m}}{(2m)!}. \quad (26)$$

Часто более удобной является реализация матричного гиперболического косинуса в виде такой суммы:

$$\text{ch}(\hat{\gamma}z) = \sum_{n=1}^N \hat{\beta}_n \text{ch}(\gamma_n z), \quad (27)$$

где через γ_k обозначены собственные числа матрицы $\hat{\gamma}$, а симметричные вырожденные матрицы $\hat{\beta}_k$ представимы в виде прямой суммы собственных векторов $\vec{e}_k$ матрицы $\hat{\gamma}$ [3]:

$$\hat{\beta}_k = c_1^{(k)} \vec{e}_k \oplus c_2^{(k)} \vec{e}_k \oplus \dots \oplus c_N^{(k)} \vec{e}_k, \quad (28)$$

где выполняется равенство

$$\hat{\gamma} \vec{e}_k = \gamma_k \vec{e}_k, \quad (29)$$

а для однозначного определения коэффициентов $c_i^{(k)}$ ($i, k = 1, 2, \dots, N$) накладыва-
ется условие симметричности матриц $\hat{\beta}_k$, а также условие

$$\sum_{k=1}^N \hat{\beta}_k = \hat{E}. \quad (30)$$

Для различных собственных чисел (а мы рассматриваем именно такую ситуацию) собственные векторы ортогональны. С учетом этого для индексов $m \neq k$ имеем

$$\hat{\beta}_m \hat{\beta}_k = \hat{O}, \quad (31)$$

где $\hat{O}$ является нулевой матрицей ранга N . Из соотношений (30) и (31) следует, что

$$\sum_{k=1}^N \hat{\beta}_k^2 = \hat{E}. \quad (32)$$

Это соотношение будет полезным при построении матрицы, обратной к матрице

$$\text{sh}(\hat{\gamma}L) = \sum_{n=1}^N \hat{\beta}_n \text{sh}(\gamma_n L). \quad (33)$$

С учетом (32) легко показать, что имеет место соотношение

$$\text{sh}(\hat{\gamma}L)^{-1} = \sum_{n=1}^N \hat{\beta}_n \frac{1}{\text{sh}(\gamma_n L)}. \quad (34)$$

Тогда окончательно для вектора распределения плотности получаем

$$\begin{aligned} \vec{\eta}(z) &= \left(\hat{\gamma}^{-1} \hat{A}^{-1} \sum_{k=1}^N \hat{\beta}_k^2 \frac{\text{ch}(\gamma_k z) - \text{ch}(\gamma_k (L - z))}{\text{sh}(\gamma_k L)} + \left(\frac{L}{2} - z \right) \hat{A}^{-1} \right) \vec{k}g = \\ &= \left(\hat{\gamma}^{-1} \hat{A}^{-1} \sum_{k=1}^N \hat{\beta}_k^2 \frac{\text{sh}(\gamma_k (L/2 - z))}{\text{ch}(\gamma_k L/2)} + \left(\frac{L}{2} - z \right) \hat{A}^{-1} \right) \vec{k}g. \end{aligned} \quad (35)$$

Видим, что распределение антисимметрично относительно центра плоского слоя.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В приближении плавной неоднородности найдено общее решение для распределения плотности многокомпонентной жидкости во внешнем поле. Полученные результаты могут быть полезными при обработке данных о рассеянии нейтронов в жидких пространственно ограниченных системах [6]. Важно также отметить, что в случае $N = 1$ из выражения (35) мы получаем профиль распределения плотности для однокомпонентной жидкости, рассчитанный ранее другими авторами (см., например, [1]).

Благодарности. Автор выражает искреннюю признательность проф. В. М. Сысоеву за полезные дискуссии и консультации.

Список литературы

- [1] Л. А. Булавин, Д. А. Гаврюшенко, В. М. Сысоев, *Журн. физ. хим.*, **70**:3 (1996), 559; **70**:11, 2102.
- [2] Л. А. Булавин, Д. А. Гаврюшенко, В. М. Сысоев, *Журн. физ. хим.*, **70**:8 (1996), 1525.
- [3] А. Н. Васильев, *ТМФ*, **135**:2 (2003), 315.
- [4] Н. П. Коваленко, И. З. Фишер, *Журн. физ. хим.*, **40**:3 (1966), 649.
- [5] Дж. Мэтьюз, Р. Уокер, *Математические методы физики*, Атомиздат, М., 1972.
- [6] В. Я. Антонченко, А. С. Давыдов, В. В. Ильин, *Основы физики воды*, Наукова думка, Киев, 1991.

Поступила в редакцию 22.05.2006