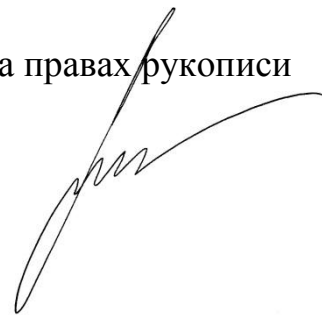


На правах рукописи



Герасимов Денис Николаевич

**МЕХАНИКА ЖИДКОСТИ И ИЗЛУЧЕНИЕ ПЛАЗМЫ  
В УЗКИХ ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИХ КАНАЛАХ**

Специальность 1.3.17. – Химическая физика, горение и взрыв, физика  
экстремальных состояний вещества

**Автореферат  
диссертации на соискание ученой степени  
доктора физико-математических наук**

Москва – 2023

Работа выполнена в Национальном исследовательском университете «МЭИ» на кафедре инженерной теплофизики, г. Москва.

**Научный консультант:** **Синкевич Олег Арсеньевич**, доктор физико-математических наук, профессор кафедры инженерной теплофизики Национального исследовательского университета «МЭИ», г. Москва.

**Официальные оппоненты:** **Деревич Игорь Владимирович**  
доктор технических наук, профессор кафедры прикладной математики МГТУ им. Н.Э. Баумана, г. Москва;

**Дьячков Лев Гаврилович**  
доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Объединенного института высоких температур РАН, г. Москва;

**Зудин Юрий Борисович**  
доктор технических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории нестационарных процессов Национального исследовательского центра «Курчатовский институт», г. Москва.

**Ведущая организация:** Институт нефтехимического синтеза имени А.В. Топчиева РАН, г. Москва.

Защита состоится 17 апреля 2024 г., начало в 15:00, на заседании диссертационного совета 02.1.003.03 на базе НИЦ «Курчатовский институт» по адресу: 123182 г. Москва, пл. Академика Курчатова, д. 1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке НИЦ «Курчатовский институт» и на сайте [www.nrcki.ru](http://www.nrcki.ru)

Автореферат разослан \_\_\_\_\_ 2024 г.

Ученый секретарь диссертационного совета 02.1.003.03 к.ф.-м.н.

Т.Е. Григорьев

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы исследования

В данной работе исследуется течение жидкости в узких каналах – каналах, диаметр которых не превышает 1 мм. Исследование физических эффектов при подобном течении как в одиночном канале, так и в их системе – в пористой среде – еще далеко от завершения.

Течение жидкости в пористой среде предлагает множество сложных задач, решение которых все еще не вполне ясно, а приложения – все более разнообразны. По отношению к «классическому» течению в круглой трубе, сильное трение (высокое гидродинамическое сопротивление) приводит здесь к ряду специфических явлений, связанных с трибоэлектричеством и триболюминесценцией, а сложная геометрия области течения – к существенно отличному макроскопическому описанию динамики жидкости.

Описание течения жидкости в пористой среде в настоящей работе производится с помощью аппарата дробных производных – метода отнюдь не нового, но активного развивающегося в наше время. Представленная в работе теория, оперирующая дробно-дифференциальным уравнением диффузии, приводит к разнообразным результатам, часть которых имеет непосредственное отношение к проблеме описания течения жидкости в пористой среде, часть – к смежным, но столь же важным вопросам (например, к форме соотношения Нернста–Эйнштейна в случае аномальной диффузии).

Сложность (комплексность) задачи о природе излучения, зачастую регистрируемого при течении жидкости в узких каналах – так называемой гидродинамической люминесценции, – приводит к необходимости рассмотрения различных вопросов, каждый из которых имеет самостоятельную ценность. Условия, при которых наблюдается излучение, роднят это явление с сонолюминесценцией – процессом, физическая природа которого неясна вот уже почти сто лет. Источником изучаемого излучения является пузырьковая плазма – весьма оригинальный объект, параметры которого до сих пор не исследованы должным образом, представляющий интерес как с теоретической, так и с практической точки зрения. В частности, представляется важным проанализировать возможность достижения в пузырьках высоких температур и, в частности, модифицировать граничные условия на межфазной поверхности в подобных системах.

Таким образом, в данной работе исследуется комплекс явлений, научная актуальность которых представляется несомненной.

### **Цель и задачи работы**

Целью работы является построение теоретического описания течения жидкости в системе узких каналов, а также выяснение физической природы излучения, возникающего при протекании жидкости под большим давлением сквозь диэлектрический канал, и характера электризации двухфазной среды, то есть установление условий внутри излучающей области. Для этого необходимо рассмотрение следующих задач.

1) Описание аномальной диффузии с помощью дробно-дифференциального уравнения конвекции-диффузии.

2) Выяснение условий, при которых макроскопическое описание явления требует использования дробной производной по времени, а также установление типа дробной производной, пригодного для использования в физических приложениях

3) Модификация уравнения аномальной диффузии с целью учета специфики задачи о протекании жидкости в пористой среде: приведение к уравнению с переменным порядком дифференцирования.

4) Анализ условий, при которых жидкость в узком канале под большим давлением излучает в оптическом диапазоне. Спектроскопический анализ подобного излучения.

5) Анализ возможных причин свечения: гипотеза о разогреве паровых полостей. Установление граничных условий на межфазной поверхности «жидкость–пар» в случае высоких температур в газовой фазе внутри пузыря.

6) Анализ возможных причин свечения: гипотеза об электрической природе свечения.

7) Определение параметров излучающей среды при гидролюминесценции, сопоставление с другими видами свечения жидкости при интенсивном механическом воздействии на нее.

### **Научная новизна**

Научную новизну представляют следующие результаты, впервые полученные в работе:

1) Теория аномальной диффузии, основанная на дробно-дифференциальном уравнении конвекции-диффузии с переменным порядком дифференцирования.

2) Описание фильтрации жидкости в системе узких неупорядоченных каналов как аномальной диффузии с привлечением математического аппарата дробно-дифференциальных уравнений.

- 3) Выяснение физической природы гидродинамической люминесценции.
- 4) Обнаружение закономерностей электризации жидкости при акустической кавитации.
- 5) Установление физической природы плазмы, возникающей при течении жидкости в узких каналах в отсутствие внешнего электрического поля.
- 6) Теория испарения, позволяющая установить граничные условия на межфазной поверхности «жидкость–пар».

### **Теоретическая и практическая значимость работы**

Аномальная диффузия – весьма широкий класс явлений, для которого течение в пористой среде – частный случай. Изложенный в работе математический аппарат в настоящее время нашел применение в различных задачах, в том числе и для собственно механики жидкости в пористой среде (см., например, недавно вышедшую монографию Н. Сю<sup>1</sup>) – для проблемы, непосредственно рассматриваемой в данной диссертационной работе. Помимо практической ценности, введенная в данной работе производная с переменным показателем дифференцирования, зависящим от искомой функции, и соответствующее уравнение диффузии являются объектом исследования многих современных математических работ<sup>2</sup>.

Полученные в работе результаты по теории испарения жидкости могут быть использованы для решения различных задач, где требуются граничные условия на межфазной поверхности «жидкость–пар», или, в целом, при анализе процессов переноса вблизи межфазной поверхности. В частности, таким образом может быть объяснен температурный скачок, измеряемый вблизи поверхности жидкости, аналитически определен коэффициент испарения и пр. [25] Активно исследуемое в настоящее время интенсивное испарение, применяемое или наблюдающееся в различных энергетических установках, также требует для своего описания полученных в работе результатов: разброс энергии связи частиц на поверхности жидкости, зависимость потока испарения от температуры, влияние потока конденсации на поток испарения и т.д.

Результаты, полученные при исследовании пузырьковой плазмы, позволяют установить физическую природу ионизированной среды, образующейся за счет трибоэффектов в жидкости, что может быть использовано для построения теории

---

<sup>1</sup> Su N. Fractional calculus for hydrology, soil science and geomechanics. CRC Press, 2021. 358 p.

<sup>2</sup> Sun H.-G. et al. A review on variable-order fractional differential equations: mathematical foundations, physical models, numerical methods and applications// Fractional Calculus and Applied Analysis. V. 22 (2019). P. 27–59.

трибоэлектричества как таковой. Проведенный в работе анализ уровней заселенности в аргон-водородной плазме может быть использован для диагностики систем подобного типа.

Выяснение природы излучения, возникающего при протекании жидкости сквозь узкий диэлектрический канал, имеет как самостоятельную ценность, так и может быть использовано для сопоставления с родственным явлением – сонолюминесценцией, хотя следует подчеркнуть, что тождественность явлений гидро- и сонолюминесценции на данный момент не представляется доказанной.

Явление гидродинамической люминесценции может быть использовано для дистанционной диагностики состава жидкости.

Метод получения интенсивно излучающей плазмы, исследованный в данной работе, является по-своему уникальным и может быть использован для создания установок плазменной обработки жидкости без использования внешних электрических полей.

Задачи об интенсивной кавитации, рассмотренные в работе, могут быть использованы при рассмотрении проблем воздействия кавитирующих пузырей на твердые поверхности; в частности, в этом смысле может быть использовано решение задачи о поле давлений вокруг осциллирующего пузырька.

### **Методология и методы исследования**

В данной диссертационной работе используются три метода исследования: эксперимент, теория и численное моделирование.

Для исследования течения жидкости в пористой среде используется математический аппарат, основанный на применении производных нецелого порядка. В работе показано, что существовавших конструкций дробных производных недостаточно, и для учета зависимости характера аномальной диффузии от содержания диффундирующей массы необходимо введение нового класса операторов – дробных производных, зависящих от искомой функции. В работе рассматриваются как аналитические решения данного уравнения в автомодельное переменных, так и соответствующие численные методы.

Исследование физических процессов при течении в одиночных узких каналах в основном опирается на самостоятельно проведенные эксперименты, где были получены результаты, интерпретация которых реализована с привлечением известных теоретических моделей спектроскопии низкотемпературной плазмы. Результаты показали существенную неравновесность излучающей плазмы, что также было получено с использованием апробированных спектроскопических методик.

Описание кавитирующих пузырей с целью анализа возможной роли тепловых эффектов в возникновении излучения, а также решение следующей отсюда задачи о кинетике процессов на межфазной поверхности реализованы как аналитическими методами – с помощью законов статистической физики, – так и путем численного моделирования. В последнем случае верификация расчетного кода осуществлялась на экспериментальных данных базы NIST (Национального института стандартов и технологий США) по плотности жидкого аргона на линии насыщения. Результаты аналитических вычислений совпадают с результатами численного моделирования.

### **Положения, выносимые на защиту**

- 1) Фильтрация жидкости в системе узких каналов является частным случаем аномальной диффузии. Данный процесс может быть описан с помощью представленного в работе дробно-дифференциального уравнения с производной по времени нецелого переменного порядка.
- 2) Производная по времени в дробно-дифференциальном уравнении диффузии в общем случае должна зависеть от концентрации диффундирующего вещества.
- 3) При течении двухфазной среды в узком канале в газовой фазе образуется неравновесная плазма с существенно различными температурами подсистем.
- 4) Гидродинамическая люминесценция жидкости обусловлена излучением образовавшейся в ее пузырьках неравновесной плазмы, а также, в случае течения люминофора, собственной люминесценцией жидкости.
- 5) Собственная люминесценция жидкости в узком канале идентична фотолюминесценции и излучению, возбуждаемому в электрических разрядах.
- 6) Функции распределения по энергии частиц вблизи поверхности жидкости могут быть описаны полученными в диссертации аналитическими выражениями. Данные соотношения коррелируют с результатами численного моделирования методом молекулярной динамики.
- 7) Кинетика процессов на межфазной поверхности может быть описана на основе полученных функций распределения по энергиям частиц.

### **Степень достоверности и апробация результатов**

Вывод об описании фильтрации жидкости в пористой среде как диффузионного процесса опирается на анализ значительного массива экспериментальных данных.

Разработанный для реализации метода молекулярной динамики код верифицируется на задаче по определению плотности жидкости с помощью данных NIST. Также полученные результаты сопоставляются с результатами других исследователей.

Разработанные теоретические зависимости следуют из фундаментальных физических соображений, проясняют результаты численного эксперимента и способны описывать такие явления, как, например, наблюдаемый в некоторых экспериментах температурный скачок вблизи поверхности жидкости, а также предсказывать значение коэффициента испарения.

Основные результаты диссертации опубликованы в трех монографиях, в учебнике, а также в 32 статьях в журналах, входящих в список Высшей аттестационной комиссии и реферативные базы «Scopus» и «Web of Science».

Материалы диссертации докладывались на следующих конференциях: «Российская национальная конференция по теплообмену – 4» (РНКТ-4) (Москва, 2006), РНКТ-5 (Москва, 2010), РНКТ-7 (Москва, 2018), РНКТ-8 (Москва, 2022), «Современные проблемы теплофизики и энергетики – II» (СПТЭ-II) (Москва, 2017), СПТЭ-III (Москва, 2020), «Теплофизика реакторов нового поколения» (Обнинск 2015, 2016), «Проблемы термоядерной энергетики и плазменные технологии» (Москва, 2009), «Результаты фундаментальных исследований в области энергетики и их практическое значение» (Москва, 2008), «Тепломассообмен и гидродинамика в закрученных потоках-II» (Москва, 2005), «10th High Temperature Plasma Processes Conference» (Patras, Greece, 2008), «6th international conference on boiling heat transfer» (Spoleto, Italy, 2006), «International Conference on Phenomena in Ionized Gases - XXV» (Nagoya, Japan, 2001).

**Личный вклад автора** заключается в:

- выводе уравнения аномальной диффузии и анализе его решений;
- создании вычислительных кодов для математического моделирования рассматриваемых процессов;
- разработке методологии экспериментов по люминесценции жидкости;
- проведении спектроскопической диагностики рассматриваемых объектов;
- анализе результатов спектроскопической диагностики, определении параметров плазмы на основании проделанных измерений;
- выводе аналитических выражений, описывающих динамику и кинетику межфазной поверхности.



### Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации с приложениями – 258 страниц машинописного текста. Диссертация содержит 124 рисунка и 9 таблиц. Список литературы содержит 185 позиций.

### СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обсуждается современное состояние проблем, связанных с протеканием жидкости в узких каналах. Обозначается цель исследования диссертационной работы, формулируются конкретные задачи и способы их решения.

**В первой главе** представлено теоретическое описание течения жидкости в пористой среде как частного случая аномальной диффузии – процесса, при котором средний квадрат смещения непропорционален времени:

$$\langle x^2 \rangle \sim t^\alpha. \quad (1)$$

Различными способами можно получить обобщения уравнения, описывающего обычную (при  $\alpha=1$ ) диффузию. Наиболее перспективным и последовательным представляется подход, использующий в уравнении Колмогорова–Эйнштейна для изменения концентрации частиц  $n$  за время  $\tau$

$$n(x, t + \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} w(\Delta, \tau) n(x + \Delta, t) d\Delta \quad (2)$$

разложение в ряды по координате  $x$  и времени  $t$ , предполагая для малых  $\tau$  существенными лишь малые смещения  $\Delta$ . Отличие от «классического» способа, приводящего к уравнению обычной диффузии, заключается в использовании в этих разложениях дробной производной (производной нецелого порядка). В итоге получается общее уравнение конвекции-диффузии

$$\frac{\partial^\alpha n}{\partial t^\alpha} = v^\alpha \frac{\partial^\alpha n}{\partial x^\alpha} + D_\alpha \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}, \quad (3)$$

где скорость определяется как  $v^\alpha = \langle \Delta^\alpha \rangle / \tau^\alpha$ , а коэффициент диффузии выражается через средний квадрат смещения

$$D_\alpha = \frac{1}{2C_\alpha \tau^\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \Delta^2 w(\Delta, \tau) d\tau = \frac{\langle \Delta^2 \rangle}{2C_\alpha \tau^\alpha}. \quad (4)$$

Коэффициент  $C_\alpha$  определяется типом используемой дробной производной.

В качестве оператора дробной производной могут быть использованы различные конструкции. Для аналитических вычислений удобна производная Маршо

$$\mathcal{D}_M^\alpha = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^t \frac{f(t) - f(t-\xi)}{\xi^{1+\alpha}} d\xi, \quad (5)$$

в то время как для численного моделирования скорее пригодна производная Грюнвальда–Летникова:

$$\mathcal{D}_{GL}^\alpha = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\Delta^\alpha f(t)}{\tau^\alpha} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\sum_{k=0}^{\infty} A_k f(t - k\tau)}{\tau^\alpha}, \quad (6)$$

где коэффициенты Грюнвальда  $A_k = (-1)^k \binom{\alpha}{k} = \frac{\Gamma(k-\alpha)}{\Gamma(-\alpha)\Gamma(k+1)}$ .

Порядок дифференцирования в (3) определяется требованием конечности коэффициента диффузии (4), то есть характером случайных блужданий (1). Таким образом, уравнение (3) принципиально способно описывать аномальную диффузию; в простейшем случае, в отсутствие конвекции, соответствующее уравнение имеет вид

$$\frac{\partial^\alpha n}{\partial t^\alpha} = D_\alpha \frac{\partial^2 n}{\partial x^2}. \quad (7)$$

В общем случае, для переменного коэффициента диффузии, уравнение (7) может быть сформулировано в виде

$$\frac{\partial^\alpha n}{\partial t^\alpha} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(n) \frac{\partial n}{\partial x} \right). \quad (8)$$

Уравнение (8) имеет автомодельное решение для переменной  $\xi = x/t^{\alpha/2}$ :

$$-\left(\frac{\alpha\xi}{2}\right)^\alpha \frac{d^\alpha n}{d\xi^\alpha} = \frac{d}{d\xi} \left( D(n) \frac{dn}{d\xi} \right). \quad (9)$$

В частном случае обычной диффузии (9) сводится к известному уравнению для переменной Больцмана  $\xi = x/\sqrt{t}$ . В свою очередь, принципиальное отличие

обычной диффузии от аномальной заключается в отсутствии корреляции между последовательными смещениями: если средний квадрат смещения зависит от времени как

$$\langle \Delta^2 \rangle = 2D_\alpha \tau^\alpha, \quad (10)$$

то среднее от двух последующих смещений за одинаковые промежутки времени

$$\delta_{12} = \langle \Delta_1 \Delta_2 \rangle = \frac{1}{4} D_\alpha \tau^\alpha (2^\alpha - 2). \quad (11)$$

Соответственно, при  $\alpha > 1$   $\delta_{12} > 0$ , и частица склонна продолжать смещение в том же направлении, в котором она двигалась первоначально; при  $\alpha < 1$   $\delta_{12} < 0$ : частица при каждом последующем смещении будет стремиться повернуть назад; при  $\alpha = 0$   $\delta_{12} = 0$ , и только в этом случае последовательные смещения частицы независимы. Иными словами, обычная диффузия является марковским процессом, в то время как аномальная – процессом немарковским.

Изложенное выше теоретическое описание аномальной диффузии позволяет использовать его в различных физических приложениях, в частности, для описания течения жидкости в пористой среде. В этом случае движение отдельных «языков» жидкости в нерегулярной структуре аналогично случайным блужданиям частицы; данная аналогия настолько укоренилась, что экспериментальные данные по измерению влагосодержанию зачастую сразу же обрабатываются в автоматической переменной Больцмана. Однако, как это было впервые отмечено в работе Кунца и Лавалье<sup>1</sup>, данный способ обработки показывает систематический «дрейф» профилей влагосодержания, измеренных в различные моменты времени. Гораздо лучше кривые описываются автоматической переменной с произвольным показателем  $\alpha$ , то есть фильтрация жидкости является примером аномальной диффузии.

В свою очередь, более тщательный анализ экспериментальных данных показывает, что и описание фильтрации как аномальной диффузии с постоянным показателем степени в (1) не является наилучшим. На рис. 1 показаны профили влагосодержания  $U$  в строительном материале (в кирпиче); как видно, автоматическая обработка не вполне удовлетворительна: профили при больших значениях  $U$  не ложатся на единую кривую.

---

<sup>1</sup> Kuntz M., Lavallee P. Experimental evidence and theoretical analysis of anomalous diffusion during water infiltration in porous building materials// J. Phys. D.: Appl. Phys. V. 34 (2001). P. 2547–2554.

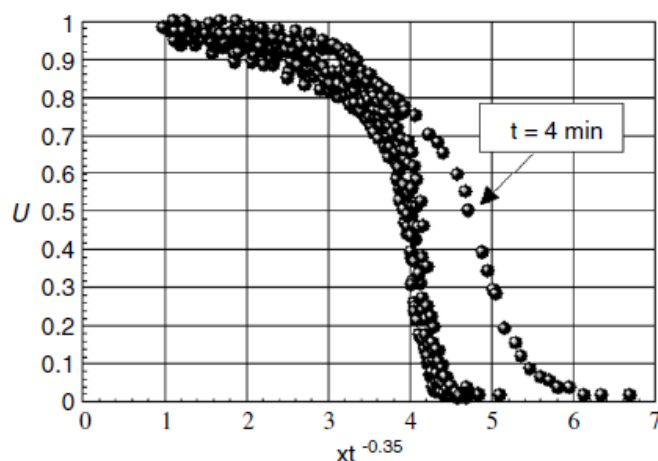


Рис. 1. Автомодельная обработка экспериментальных данных<sup>1</sup>.

Профиль, измеренный для момента времени 4 мин., не ложится на остальные; по-видимому, как это было указано в нашей работе [31], имела место просто опечатка: профиль, измеренный для  $t = 7$  мин., полностью согласуется с остальными.

Причина, по которой профили на рис. 1 сильно различаются при больших значениях  $U$ , заключается в зависимости характера диффузии от количества вещества, т.е. в данном случае – от влагосодержания. При значительном влагосодержании жидкость в порах среды уже не имеет равновероятного выбора для последующего смещения: в данном случае, поскольку при движении «вперед» поры «позади» жидкости уже заняты ею, вероятность последующего смещения «вперед» повышается. Таким образом, при больших значениях  $U$  последовательные смещения коррелированы, т.е. параметр  $\alpha$  в (1) является возрастающей функцией от  $U$ .

Описание аномальной диффузии с помощью дробно-дифференциального уравнения (8) позволяет обобщить теорию на случай зависимости  $\alpha(U)$  в виде

$$\frac{\partial^{\alpha(U)} U}{\partial t^{\alpha(U)}} = \frac{\partial}{\partial x} \left( D(U) \frac{\partial U}{\partial x} \right), \quad (12)$$

где дробная производная с переменным порядком дифференцирования понимается в смысле Грюнвальда–Летникова

<sup>1</sup> Hazrati K. et al. Determination of isothermal unsaturated capillary flow in high performance cement mortars by NMR imaging// Mat. Struct. V. 35 (2002). P. 614–622.

$$\frac{\partial^{\alpha(U(x,t))} U(x,t)}{\partial t^{\alpha(U(x,t))}} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\Delta^{\alpha} U(x,t)}{\tau^{\alpha(U(x,t))}} = \lim_{\tau \rightarrow 0} \frac{\sum_{k=0}^{\infty} A_k U(x,t-k\tau)}{\tau^{\alpha(U(x,t))}}. \quad (13)$$

Таким образом удается смоделировать распространение жидкости в пористой среде. На рис. 2 показано сопоставление экспериментальных профилей с расчетными, полученными с помощью (12), где применена часто используемая форма коэффициента диффузии  $D(U) = D_0 \exp(\beta U)$  с параметрами  $\alpha = 0.9$  при  $U < 0.5$ ,  $\alpha = 1.2$  при  $U \geq 0.5$ ,  $D_0 = 2.2 \text{ мм}^2/\text{мин}^{0.9/1.2}$ ,  $\beta = 2.4$ .

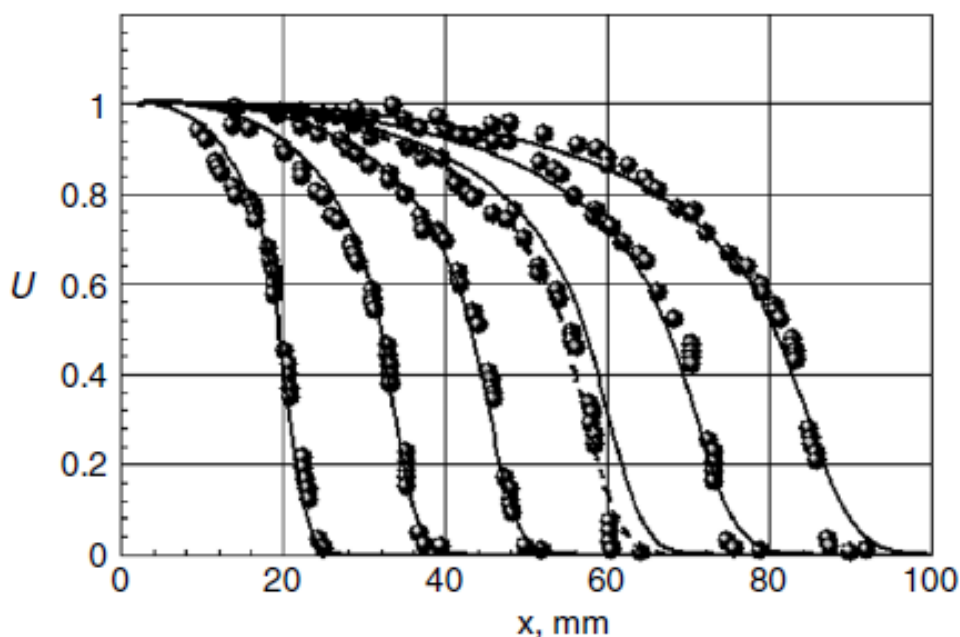


Рис. 2. Экспериментальные данные<sup>1</sup> в сравнении с расчетом по уравнению аномальной диффузии с переменной  $\alpha$ . Профили влагосодержания соответствуют моментам времени 4, 9, 15, 25, 34, 47 мин; пунктир – расчет для 23 мин.

**Во второй главе** рассматривается методология исследований течения жидкости в одиночном диэлектрическом канале применительно к давней проблеме свечения жидкости при интенсивном механическом воздействии на нее.

Наиболее известным примером подобного свечения является сонолюминесценция – излучение жидкости при ультразвуковом воздействии. Ранее этот же термин применялся и для свечения жидкости при ее течении в узком

<sup>1</sup> Pel L. et al. Water absorption in a fired-clay brick observed by NMR scanning// J. Phys. D: Appl. Phys. V. 28 (1995). P. 675–680.

канале, однако позже для этого явления был найден более удобный и корректный термин – гидродинамическая люминесценция<sup>1</sup> (гидролюминесценция).

В данной работе исследовалась гидролюминесценция различных жидкостей (воды, масла И-40А, глицерина) на установках, типичная схема которых приведена на рис. 3: конкретнее, на данной установке исследовалось свечение при течении воды; прочие установки являлись модификациями приведенной на рис. 3.

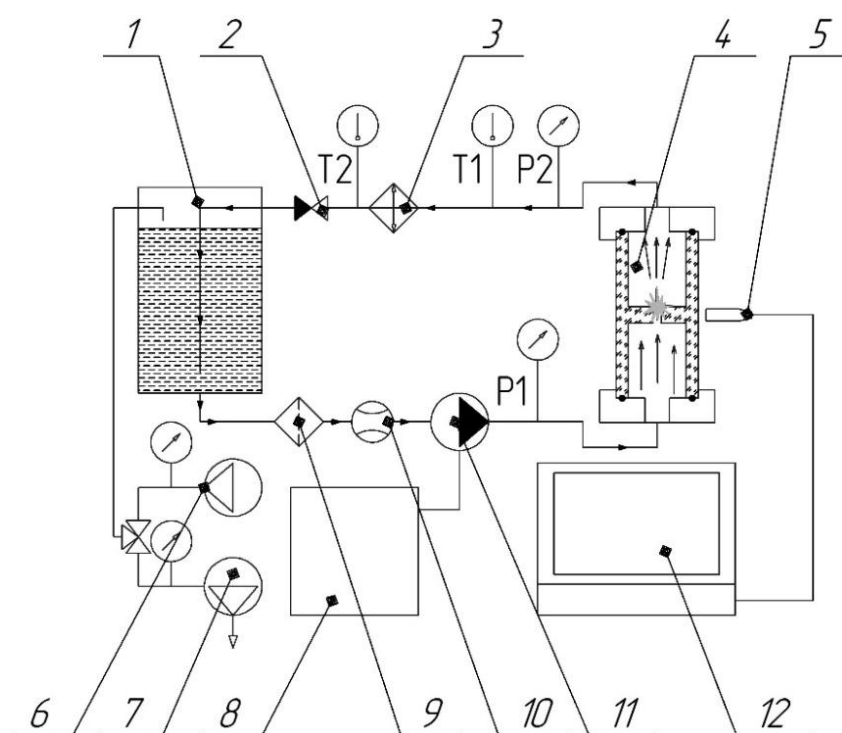


Рис. 3. Экспериментальная установка для исследования гидродинамической люминесценции воды. Здесь: 1 – резервуар с дистиллированной водой; 2 – обратный клапан; 3 – теплообменник типа труба в трубе; 4 – рабочий участок для генерации люминесценции; 5 – спектрометр AvaSpec; 6 – баллон с аргоном; 7 – вакуумный насос; 8 – векторный преобразователь E3-9100-010H; 9 – система фильтров; 10 – расходомер; 11 – насос высокого давления WS 151 ('InterPumpGroup'); 12 – компьютер.

Аргон добавлялся в рабочую среду в попытке использовать «аргоновый термометр» для определения электронной температуры; данная попытка оказалась не вполне удачной, что будет продемонстрировано в третьей главе.

В установке жидкость прокачивается через сужающийся рабочий участок, показанный на рис. 4. При течении жидкости в таком участке на его фланцах (см.

<sup>1</sup> Маргулис М.А., Пильгунов В.Н. Свечение и электризация при течении диэлектрических жидкостей в узких каналах//ЖФХ. Т. 83 (2009). С. 1585–1590.

рис. 3) возникает разность потенциалов  $\sim 100$  В, а в канале – достаточно интенсивное свечение, фотография которого приведена на рис. 5.

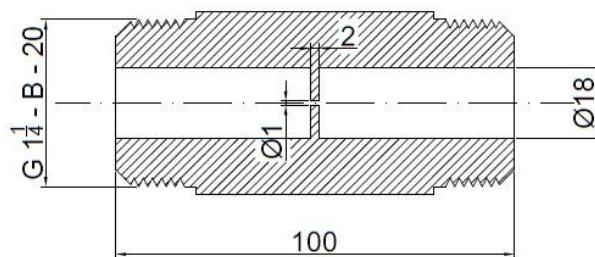


Рис. 4. Рабочий участок.

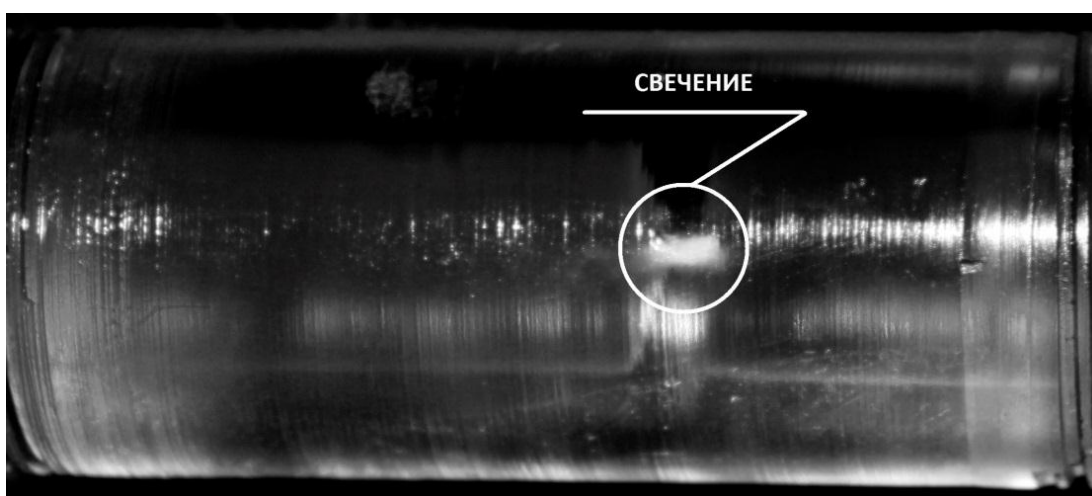


Рис. 5. Гидродинамическая люминесценция масла.

Гидролюминесценция – достаточно яркое свечение в отличие от сонолюминесценции, оно может быть зарегистрировано обыкновенными спектрометрами типа использованных в работе спектрометров AvaSpec-2048. В работе использовались два спектрометра:

1) Одноканальный спектрометр AvaSpec-2048; диапазон измерений от 180 нм до 1100 нм; разрешение – параметр ПШПВ (FWHM): полная ширина на полувысоте (наблюдаемого пика) – 2.4 нм.

2) Четырехканальный спектрометр AvaSpec-2048; характеристики каналов: канал 1 – диапазон 178–1100 нм, разрешение 1.2 нм; канал 2 – диапазон 196–370 нм, разрешение 0.2 нм; канал 3 – диапазон 353–609 нм, разрешение 0.3 нм; канал 4 – диапазон 594–815 нм, разрешение 0.26 нм.

Четырехканальный спектрометр имеет лучшее разрешение, но обладает худшей чувствительностью. Поэтому для снятия обзорных спектров использовался, как правило, одноканальный спектрометр, а для выявления отдельных деталей спектра – четырехканальный.

Для анализа температуры излучающей среды использовалось самостоятельно разработанное программное обеспечение, с помощью которого рассчитывался теоретический спектр излучения, который сравнивался затем с экспериментальным путем подбора соответствующих температур (электронной, колебательной, вращательной). Расчетная формула имеет вид

$$I_{calc}(\lambda) = \sum_i I^i(\lambda^i) \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(\lambda^i - \lambda)^2}{2\sigma^2}\right), \quad (14)$$

где интенсивность отдельной линии определялась для излучения атомов – по формуле

$$I^i = \frac{hc}{\lambda} A_{mn} N_m, \quad (15)$$

где вероятность перехода  $A_{mn}$ , концентрация атомов на верхнем уровне

$N_m = N_0 \frac{g_m}{Z(T)} \exp\left(-\frac{E_m}{kT}\right)$ ; для молекул – по формуле

$$I_{v'v''}^{J'J''} = C \frac{S^{J'J''} q_{v'v''}}{\lambda^4} \exp\left(-\frac{E_v}{kT_v}\right) \exp\left(-\frac{E_r}{kT_r}\right). \quad (16)$$

В соотношении (16)  $S^{J'J''}$  – факторы Хенля–Лондона, описывающие вероятность вращательного перехода,  $q_{v'v''}$  – факторы Франка–Кондона для колебательного перехода,  $E_v$  – энергия колебательного уровня,  $E_r$  – энергия вращательного уровня,  $T_v$  и  $T_r$  – вращательная и колебательная температуры соответственно.

Как следует из формулы (14), уширение каждой линии предполагается аппаратным (гауссовским) с одинаковым параметром  $\sigma$ ; данное утверждение основывается на том, что физические механизмы уширения линий в данных условиях менее 0.1 нм, т.е. гораздо меньше аппаратного (~1 нм); гауссовость формы линии нуждается в дополнительной проверке. На рис. 6 показан расчетный спектр излучения дуговой аргоновой плазмы в сравнении с экспериментальным, на рис. 7 – теоретический спектр излучения коронного разряда в воздухе.



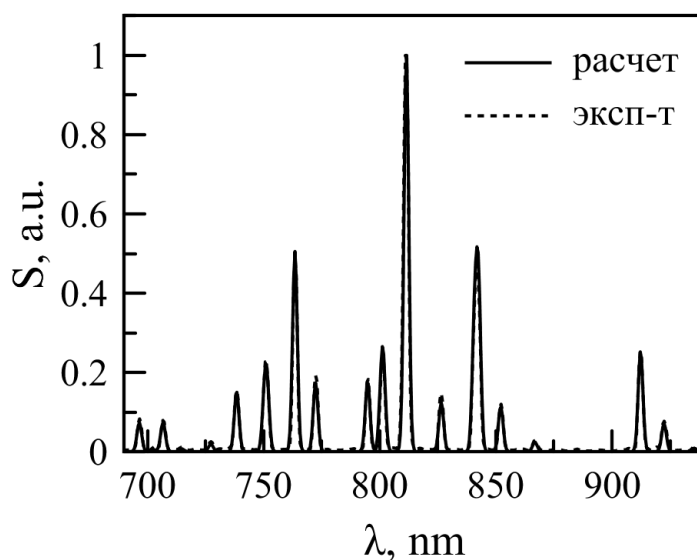


Рис. 6. Спектр излучения аргоновой плазмы.

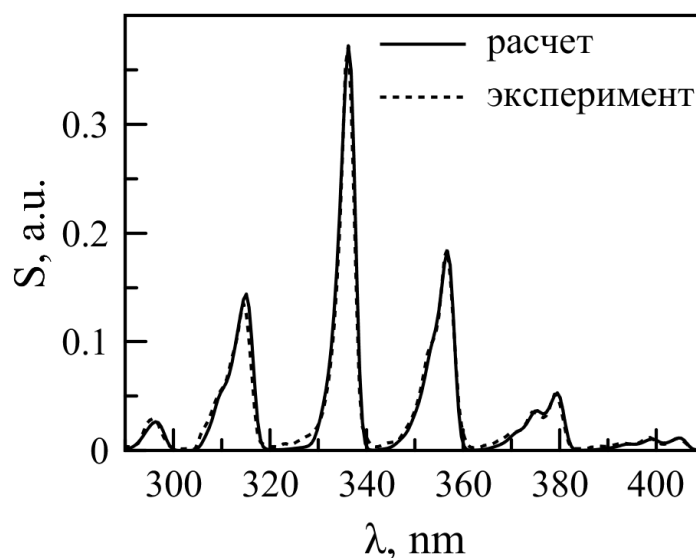


Рис. 7. Спектр излучения коронного разряда в воздухе.

Как видно, во всех случаях удается добиться хорошего совпадения расчетных и экспериментальных спектров, несмотря на перекрытие отдельных спектральных линий. Для подбора колебательной и вращательной температуры минимизируется невязка между расчетным и экспериментальным спектром:

$$\varepsilon^2 = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \frac{(I_{calc}^i(\lambda^i, T_v, T_r) - I_{exp}^i)^2}{(I_{calc}^i(\lambda^i, T_v, T_r))^2}. \quad (17)$$

График невязки, рассчитанной по формуле (17), изображен на рис. 8.

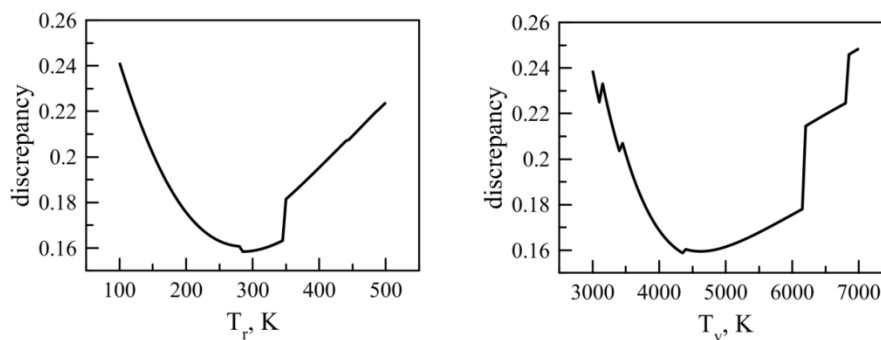


Рис. 8. Невязка между расчетным и экспериментальным спектром.

**В третьей главе** приведены результаты спектроскопического исследования гидродинамической люминесценции. Обзорный спектр гидролюминесценции воды, полученный на установке, схема которой изображена на рис. 3, показан на рис. 9.

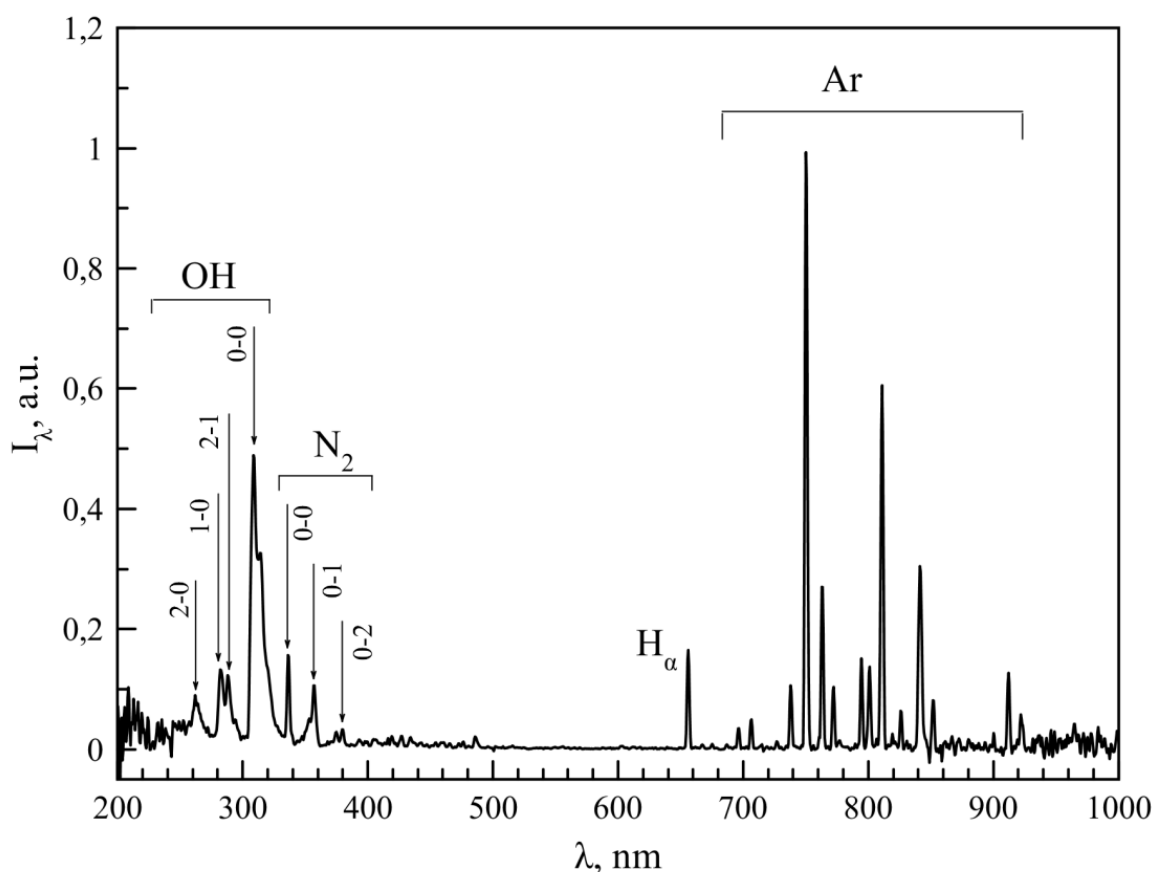


Рис. 9. Спектр гидролюминесценции воды (с добавлением аргона). Цифрами обозначены колебательные переходы.

Таким образом, спектр состоит из излучения молекул гидроксила (переход  $A^2\Sigma^+ - X^2\Pi$ ) и азота (переход  $C^3\Pi - B^3\Pi$ ), а также из излучения атомов водорода (бальмеровская серия) и аргона; в некоторых экспериментах удавалось также наблюдать излучение атомарного кислорода.

Наличие в спектре излучения водорода и гидроксила свидетельствует о протекании реакции диссоциации воды, причем интенсивность излучения продуктов диссоциации меняется по отношению к интенсивности излучения азота на различных участках канала, см. рис. 10.

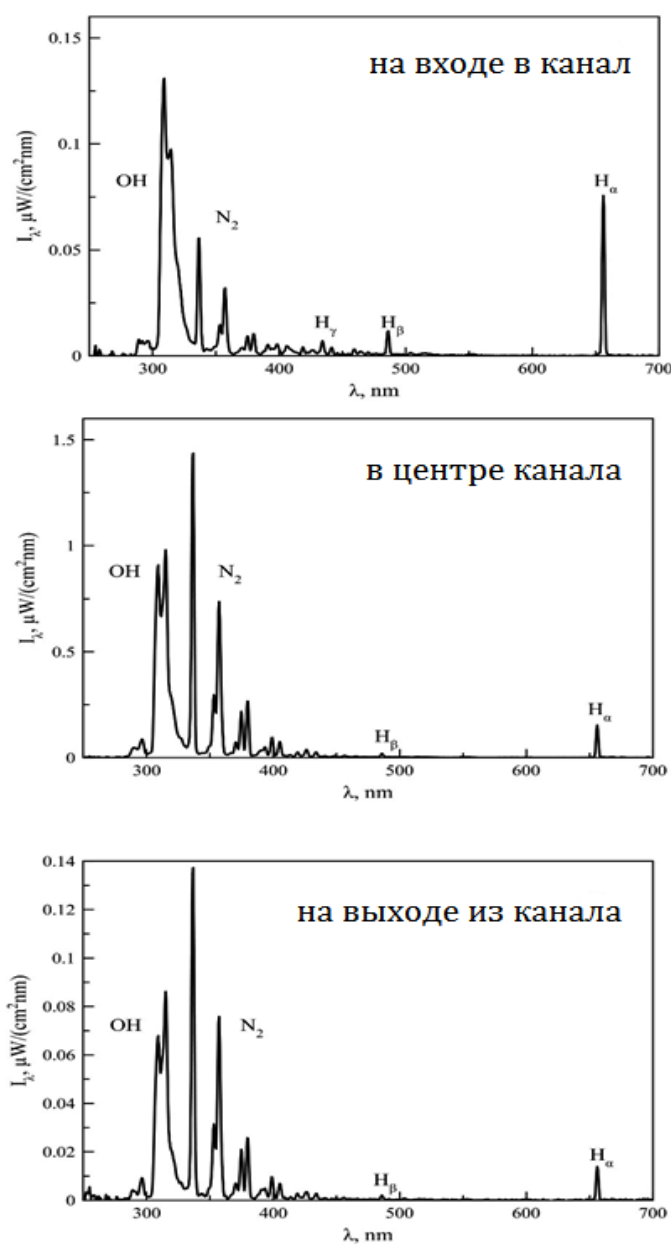


Рис. 10. Спектры излучения на различных участках канала.

Результаты обработки спектров показаны на рис. 11; температуры оказались равными

$$T_v = 4500 \text{ K} , T_r = 300 \text{ K} . \quad (18)$$

Погрешность указанных значений составляет около 10%.

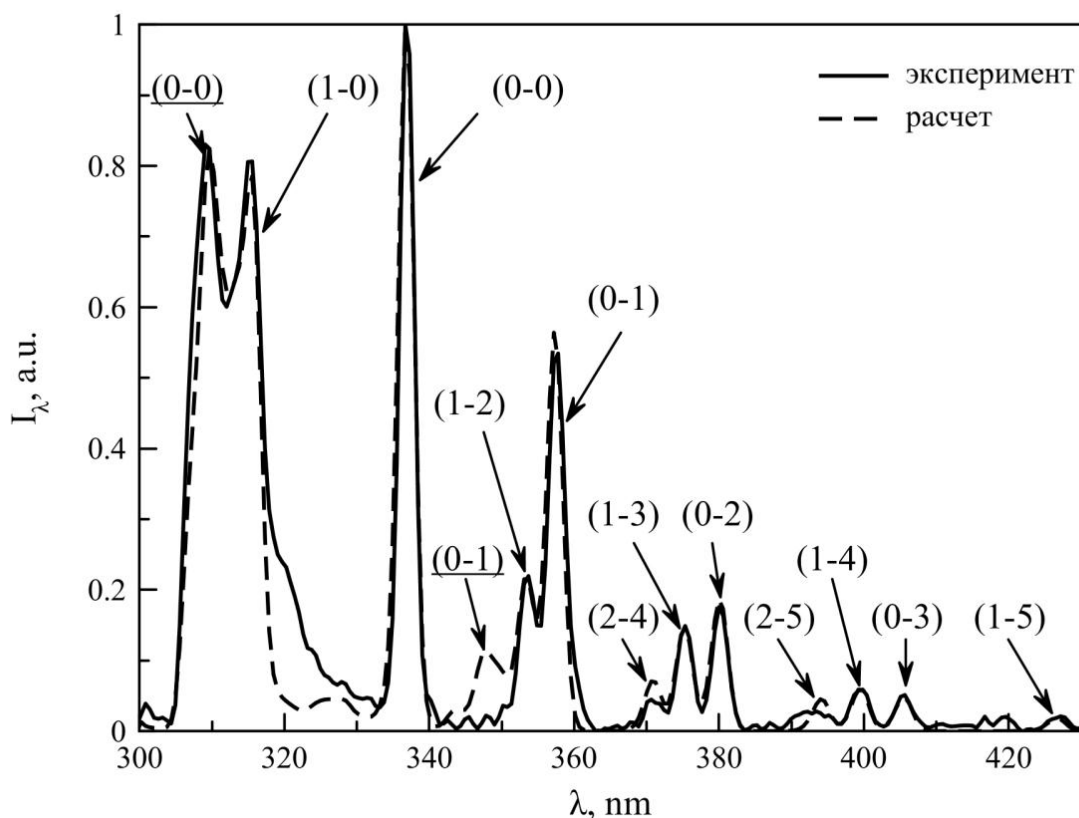


Рис. 11. Сопоставление экспериментального и расчетного спектра гидролюминесценции воды. Переходы гидроксила подчеркнуты.

Для описания «хвоста» перехода 0–0 молекулы OH (см. на рис. 11 спектр на длинах волн  $\sim 315\text{--}330$  нм) необходимо заложить в расчет вращательную температуру  $\sim 10^4$  К. Этот эффект – когда для описания уровней гидроксила с высокими энергиями нужна гораздо большая температура, чем для низкоэнергетических уровней – хорошо известен в литературе<sup>1</sup>, он объясняется приобретением высокой вращательной энергии молекулой гидроксила в момент ее образования из молекулы воды.

Таким образом, в качестве оценки газовой температуры среды следует использовать температуру 300 К, получающуюся для переходов гидроксила с

<sup>1</sup> Carrington T., Angular momentum distribution and emission spectrum of OH in the photodissociation of H<sub>2</sub>O// J. Chem. Phys. V. 41 (1964). P. 2012–2018.

низкими энергиями и азота. В целом, столь сильное отличие колебательной температуры от вращательной уже свидетельствует о сильной неравновесности излучаемой среды.

«Аргоновый термометр» позволил не более чем оценить температуру возбужденных уровней аргона (которую при некоторых допущениях можно соотнести с электронной температурой) как

$$T_e = 10000 \pm 2500 \text{ К} . \quad (19)$$

Расчетный и экспериментальный спектр аргона показан на рис. 12. Из рис. 12 следует также и объяснение большой погрешности температуры (19): заселение уровней аргона оказывается существенно неравновесным.

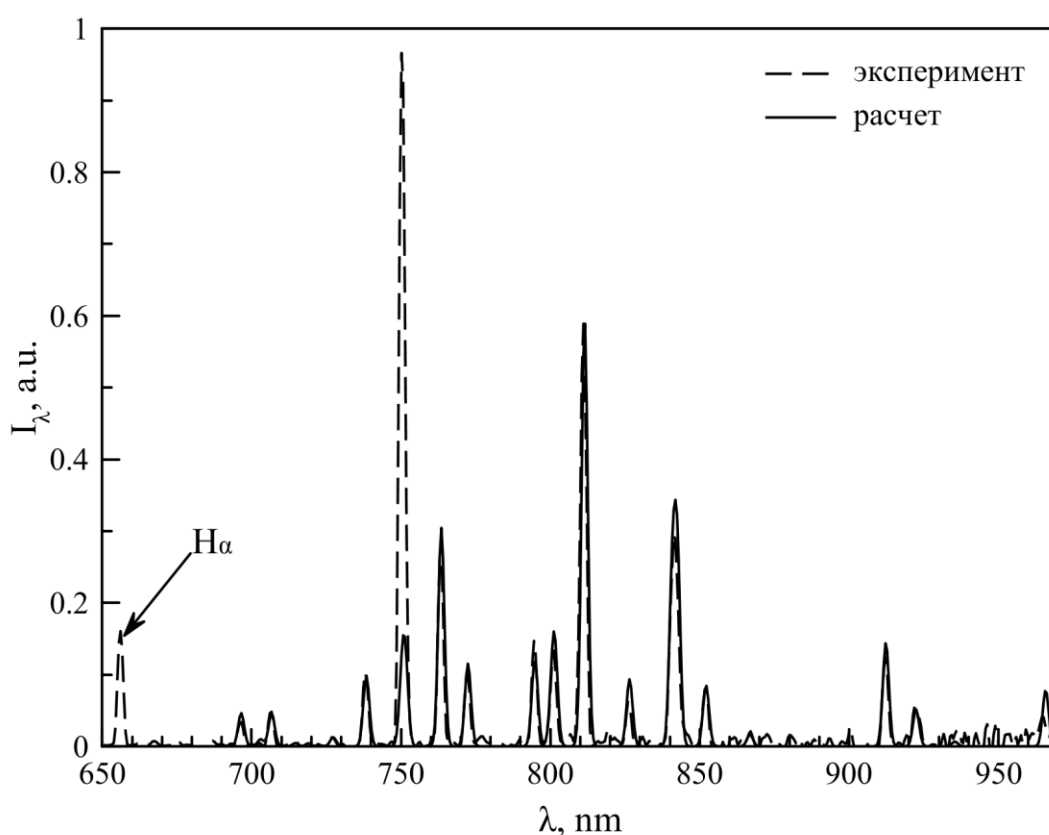


Рис. 12. Сопоставление расчетного и экспериментального спектра Ar.

Особенно обращает на себя отличие интенсивности линии на длине волны  $\sim 750$  нм: в экспериментальном спектре эта линия оказывается наиболее яркой, в то время как расчетное значение интенсивности (соответствующее равновесному распределению заселенностей) должно быть ниже в несколько раз. Вблизи длины волны находятся две линии аргона; на спектре, снятом с лучшим разрешением (см. рис. 13), видно, что перезаселенным оказывается уровень  $3s^23p^5(2P^{\circ}_{1/2})4p$  с энергией  $E_A = 13.47988670$  эВ.

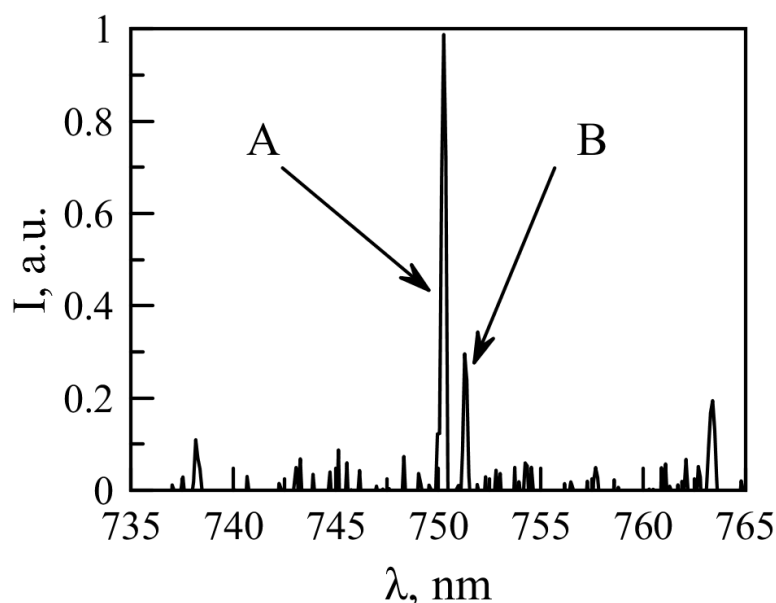


Рис. 13. Излучение аргона: А – линия с  $\lambda = 750.3868$  нм, верхний терм  $3s^23p^5(^2P^{\circ}_{1/2})4p$ ; В –  $\lambda = 751.4651$  нм, верхний терм  $3s^23p^5(^2P^{\circ}_{3/2})4p$ .

По всей видимости, столь сильное перезаселение данного уровня обусловлено реакцией диссоциативной рекомбинации водорода с участием иона  $\text{ArH}^+$ :



В результате данной реакции перезаселенным оказывается уровень аргона с энергией, близкой к энергии ионизации водорода.

Распределение атомов аргона по возбужденным уровням не является равновесным, даже если исключить из рассмотрения обсуждавшуюся выше отдельную линию. На рис. 14 показано распределение заселенностей уровней аргона, определяемых как

$$N_i = \frac{I_{ik}}{A_{ik}g_i(hc/\lambda_{ik})}, \quad (21)$$

где  $I_{ik}$  – интенсивность излучения при переходе с  $i$ -го уровня на  $k$ -й; для каждого уровня брались по две линии из измеренного спектра.

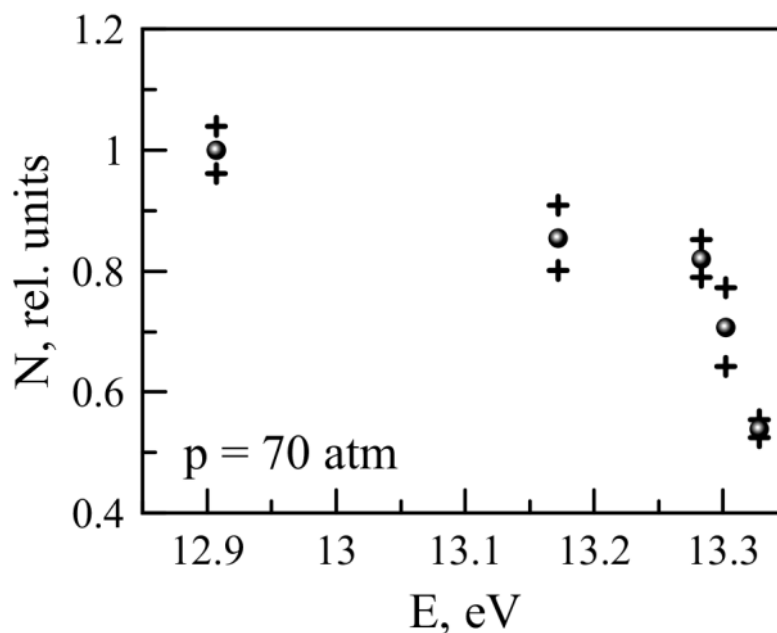


Рис. 14. Заселенность уровней аргона в исследуемой плазме: знак «+» – определенные из эксперимента значения, точки – средние значения.

Используя различные теоретические модели, можно получить из измеренной зависимости заселенности значения электронной температуры  $\sim 1$  эВ или выше. Так, если использовать диффузионную модель<sup>1</sup>, которая предсказывает перегиб функции заселенности на энергии  $E_m \sim 3kT_e/2$ , то отсюда следует значение электронной температуры  $T_e \sim 9$  эВ. Если анализировать наклон двух характерных участков на рис. 14, то энергия уровней с «маленькой» энергией  $\sim 0.6$  эВ, с «большой энергией»  $\sim 9$  эВ. Наконец, если предположить, что при энергии электронов, значительно превышающей разницу энергии между уровнями, электронные переходы в атоме равновероятны, отсюда просто будет следовать, что энергия электронов значительно превышает 0.1 эВ, и более точное заключение не представляется возможным.

Спектроскопические исследования гидролюминесценции и воды, и масла И-40А дают близкие результаты, в том числе по вычисленным значениям колебательной (4000–5000 К) и вращательной ( $\sim 300$  К) температуры. Между тем, спектр гидродинамической люминесценции масла, показанный на рис. 15, имеет интересное отличие: на нем отчетливо различима сплошная составляющая.

<sup>1</sup> Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982. 375 с.

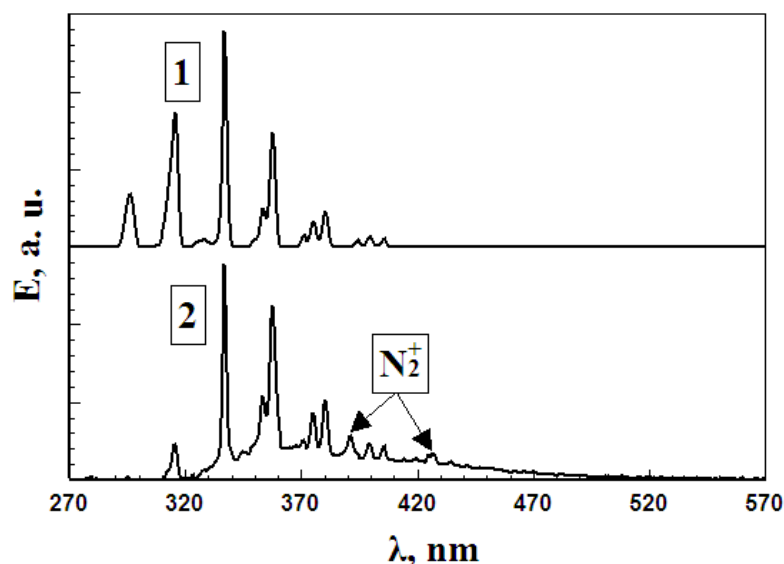


Рис. 15. Спектр гидродинамической люминесценции масла И-40А в сравнении со спектром второй положительной серии азота.

Изображенная на рис. 15  $2^+$ -серия азота «лежит» на некотором непрерывном спектре, природа которого оказывается связанной с собственной люминесценцией масла. Подобные сплошные спектры можно возбудить с помощью ультрафиолетового источника излучения, спектр которого показан на рис. 16.

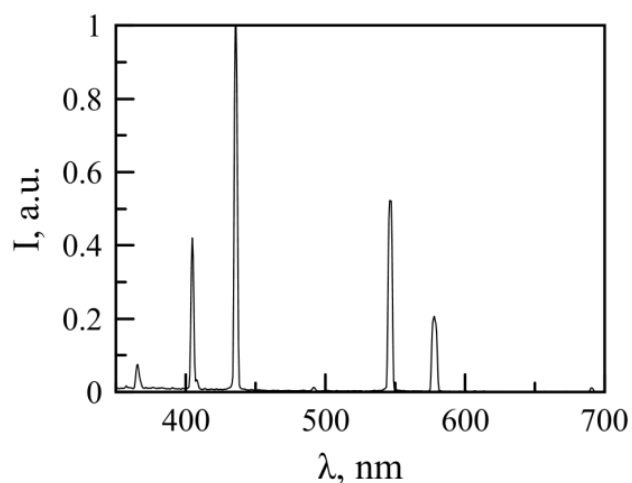


Рис. 16. Спектр источника ультрафиолетового излучения.

На рис. 17 приведены спектры фотолюминесценции в сравнении со спектрами, наблюдаемыми при гидролюминесценции масла. Как следует из этих графиков, спектры полностью совпадают.



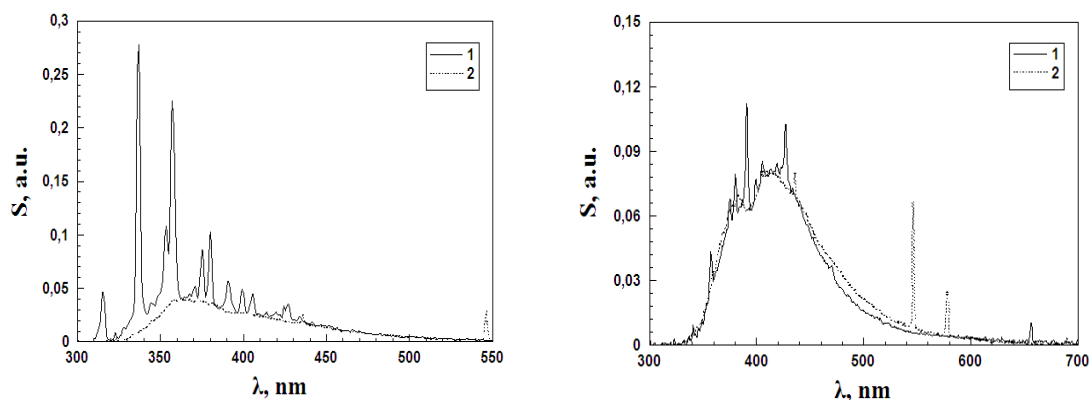


Рис. 17. Сравнение спектров гидролюминесценции (1) со спектрами фотолюминесценции (2).

Далее в третьей главе показывается, что и спектры, наблюдаемые при электрическом разряде в масле И-40А, идентичны полученным в других условиях. Спектр, наблюдаемый при электрическом разряде, также можно аппроксимировать с помощью кривых высвечивания отдельных люминесцентных центров (см. рис. 17).

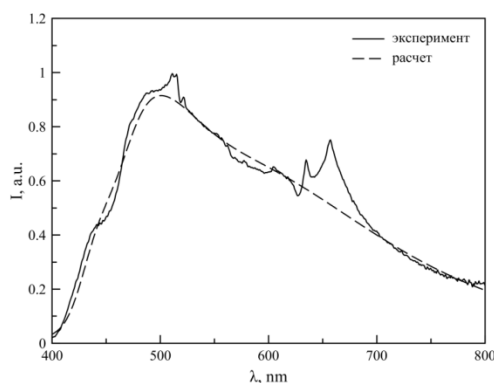


Рис. 17. Спектр электрического разряда в масле.

Таким образом, спектр гидролюминесценции масла не содержит в себе каких-либо уникальных компонент по сравнению с излучением этого масла при других способах возбуждения: при фотолюминесценции и в электрическом разряде.

Суммируя результаты третьей главы, можно заключить, что гидродинамическая люминесценция состоит из излучения компонент сильнонеравновесной плазмы, образующейся в пузырьках жидкости при течении ее в узком диэлектрическом канале, а также – в случае течения люминофора – из собственной ее люминесценции.

**В четвертой главе** рассматривается динамика гетерогенных процессов, имеющих место на границе раздела жидкости с другой фазой – твердой и газообразной. Прежде всего, анализируется возможность достижения в схлопывающемся кавитирующем пузырьке высоких температур. Для этого записывается уравнение Рэлея для сферического пузыря радиуса  $R$ :

$$\frac{3}{2} \dot{R}^2 + R\ddot{R} = \frac{\Delta p}{\rho}. \quad (22)$$

Его общее решение может быть выраженный через интеграл, описывающий зависимость скорости стенки пузыря  $U$  от его радиуса:

$$U^2 = \frac{2}{\rho R^3} \int_{R_0}^R R^2 \Delta p(R) dR. \quad (23)$$

Для различных внешних условий (для различных выражений для перепада давления  $\Delta p$ ) можно получить решения (23), т.е. фазовые портреты системы. Так, для адиабатного пузырька, для которого перепад давлений выражается через адиабату Пуассона  $\Delta p = \frac{C}{R^{3\gamma}} - p_\infty$  ( $\gamma$  – показатель адиабаты) получаем

$$U = \pm \sqrt{\frac{A}{R^3} - \frac{B}{R^{3\gamma}} - D}, \quad (24)$$

где константы  $A = \frac{2p_\infty R_0^3}{3\rho} + \frac{2C}{3\rho(\gamma-1)R_0^{3(\gamma-1)}}$ ,  $B = \frac{2C}{3\rho(\gamma-1)}$ ,  $C = p_0 R_0^{3\gamma}$ ,  $D = \frac{2p_\infty}{3\rho}$ .

С другой стороны, в условиях интенсивного теплообмена можно рассматривать противоположный предельный случай – колебания пузырька при постоянной температуре. Аналогичным образом можно получить решение для изотермического пузырька:

$$U^2 = \frac{2C}{\rho R^3} \ln\left(\frac{R}{R_0}\right) - \frac{2p_\infty}{3\rho} + \frac{2p_\infty}{3\rho} \left(\frac{R_0}{R}\right)^3. \quad (25)$$

Пример фазового портрета показан на рис. 18 для пузырька с начальным радиусом  $R(0) = R_0 = 10$  мкм в воде при  $p(0) = p_0 = 10^5$  Па и внешнем давлении  $p_\infty = 10^3$  Па.

Как следует из рисунка 18, различия между динамическими характеристиками пузырька достаточно невелики (в рассмотренных условиях они имеют значение  $\sim 20\%$ ), что делает практически невозможным экспериментальное определение условий колебания пузырька по наблюдению его динамики.

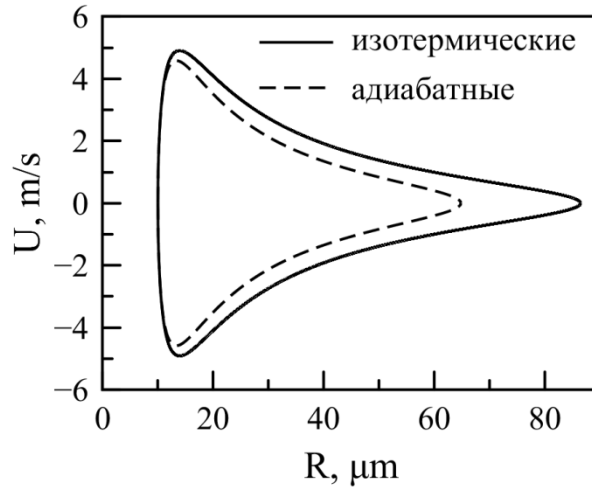


Рис. 18. Фазовый портрет колебаний пузырька при адиабатных и изотермических колебаниях.

В случаях, когда адиабатный пузырек схлопывается при высоком внешнем давлении, в нем могут достигаться значительные температуры. На рис. 19 показана эволюция температуры внутри пузырька при различном внешнем давлении (расчет в соответствии с уравнением состояния идеального газа).

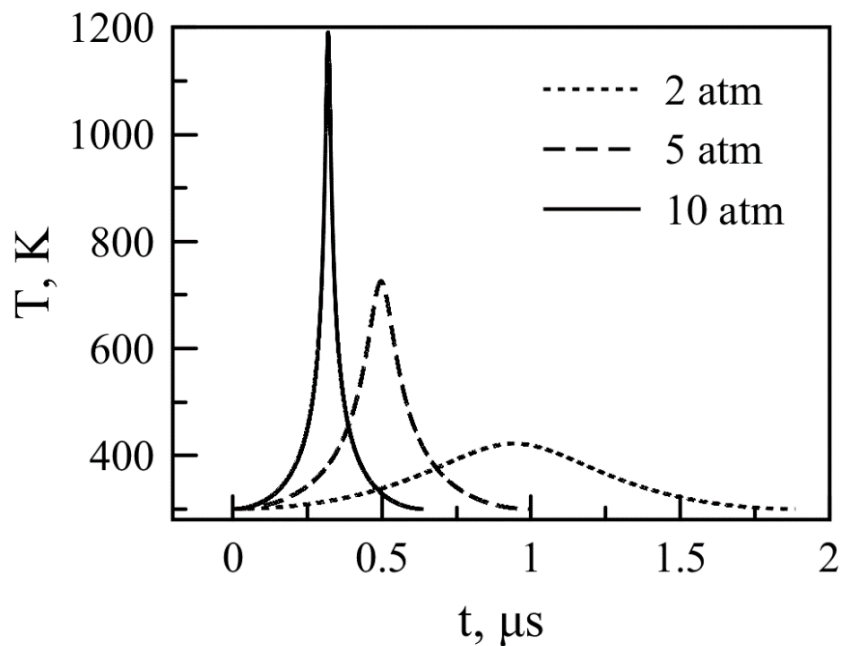


Рис. 19. Температура внутри схлопывающегося пузырька при различном внешнем давлении.

Таким образом, в схлопывающемся пузырьке могут достигаться значительные температуры, что, в свою очередь, должно приводить к росту массы пара внутри пузыря, и, как следствие, к повышению давления в нем.

В простейшем случае, при макроскопическом описании испарения, в случае появления дополнительной массы пара внутри пузырька, уравнение адиабаты может быть скорректировано следующим образом:

$$TV^{\frac{\gamma-1}{\omega}} = const, \quad (26)$$

где параметр  $\omega$  выражается через скорость изменения массы пара в пузыре с ростом температуры  $m_T$ :  $\omega = 1 + fm_T$ , множитель  $f$  определяется термодинамическими функциями вещества, главным образом – энтальпией фазового перехода.

Для использования (26) необходимо выражение для  $m_T$ . С этой целью в диссертационной работе рассмотрена кинетика испарения жидкости, основывающаяся на фундаментальных атомистических представлениях.

Будем рассматривать вылет частиц (атомов или молекул) с поверхности жидкости, нормаль к которой обозначим как  $z$ ; соответственно, оси  $x$  и  $y$  лежат в плоскости поверхности жидкости. Для определения потоков на поверхности жидкости используется представление о потенциальном барьере – энергии связи  $U = \frac{mv_0^2}{2}$ , которую необходимо преодолеть частице жидкости в направлении  $z$ , чтобы вылететь с ее поверхности. Таким образом, для максвелловского распределения частиц жидкости по скоростям

$$f(v) = \sqrt{\frac{m}{2\pi kT}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \quad (27)$$

функция распределения вылетевших частиц будет равна

$$f(v)dv = A \frac{v}{\sqrt{v^2 + v_0^2}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{mv_0^2}{2kT}\right) dv, \quad (28)$$

где множитель определяется из условия нормировки на единицу

$$A = \sqrt{\frac{2m}{kT}} \frac{1}{\Gamma\left(\frac{1}{2}, \frac{mv_0^2}{2kT}\right)}. \quad (29)$$

Для большой энергии связи, такой что  $U \gg kT$  и во всем существенном интервале скоростей  $v_0 \gg v$ , формулу (27) можно упростить:

$$f(v) = \frac{mv}{\bar{\varepsilon}} \exp\left(-\frac{mv^2}{2\bar{\varepsilon}}\right), \quad (30)$$

где  $\bar{\varepsilon} = kT$ .

Таким образом, средняя кинетическая энергия частиц, покинувших жидкость, соответствующая  $z$ -компоненте скорости, равна температуре жидкости (в энергетических единицах)  $T$ , в то время как частицы внутри жидкости имеет аналогичную энергию  $T/2$ . Объяснение этому заключается в том, что жидкость покидает «высокоэнергетический хвост» частиц.

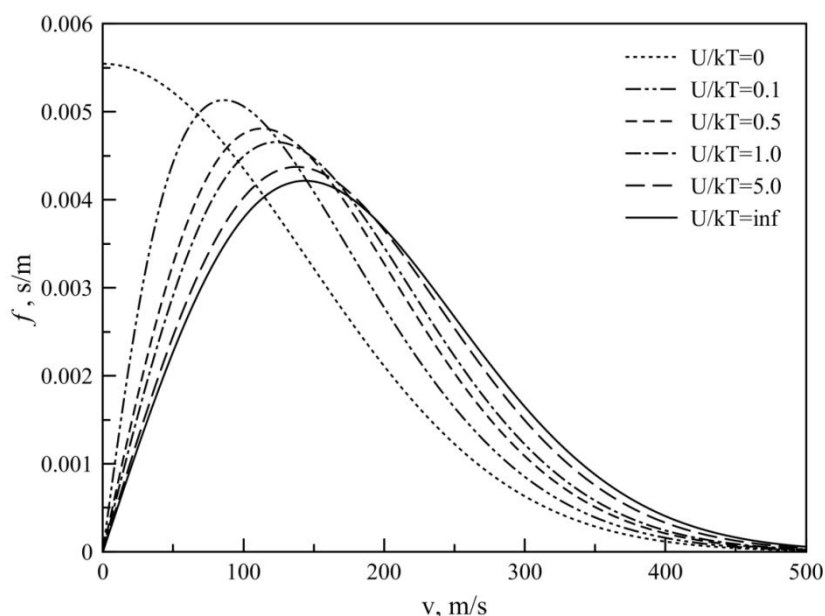


Рис. 20. Функция распределения (28) для различной энергии связи; сплошная линия – функция распределения (30).

На рис. 20 показаны функции распределения покинувших жидкость частиц по скоростям в зависимости от безразмерной энергии связи  $U$ , откуда следует, что уже при безразмерной энергии связи порядка нескольких единиц функция распределения с хорошей точностью описывается формулой (30).

В свою очередь, энергия связи не равна некоему постоянному значению, а имеет статистическое распределение, как и любая другая физическая величина. Для того чтобы найти указанное распределение – фактически, распределение по потенциальной энергии частиц на поверхности жидкости – запишем функцию распределения по потенциальной энергии частицы как

$$g(u) = \int_0^{\infty} g_{\varepsilon}(\varepsilon, u) f(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (31)$$

где максвелловская функция по кинетической энергии

$$f(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}(kT)^3} \sqrt{\varepsilon} \exp\left(-\frac{\varepsilon}{kT}\right), \quad (32)$$

а условная функция распределения является устойчивой функцией распределения с конечной дисперсией

$$g_{\varepsilon}(\varepsilon, u) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}(k\theta)^2} \exp\left(-\frac{(\varepsilon - u - l_m)^2}{2(k\theta)^2}\right). \quad (33)$$

Вместо температуры в (33) фигурирует параметр  $\theta$ ; в случае полного равновесия можно было бы ожидать равенства  $\theta = T$ , однако на испаряющейся поверхности можно ожидать отклонения от равновесия и, следовательно,  $\theta \neq T$ . Далее этот факт также будет проверяться численно.

В итоге, дисперсия потенциальной энергии

$$D_u = 1.5(kT)^2 + (k\theta)^2. \quad (34)$$

Способом, аналогичным (31), могут быть получены функции распределения по полной энергии частицы

$$F_s(s) = \int_0^{\infty} g(s - \varepsilon) f(\varepsilon) d\varepsilon \quad (35)$$

и по ее лагранжиану

$$F_l(l) = \int_0^{\infty} g(\varepsilon - l) f(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (36)$$

Данные выражения также будут сопоставляться с результатами численного моделирования испарения жидкости. При подобных сравнениях следует иметь в виду, что средние величины по результатам численного эксперимента неизбежно вычисляются на различных расстояниях от поверхности, где частицы вследствие этого имеют несколько разную среднюю энергию связи. Таким образом, и дисперсия потенциальной энергии будет отличаться от (34); в предположении об одинаковой вероятности средней энергии связи в диапазоне  $\Delta u_m$  вместо параметра  $\theta$  в численном моделировании будет получаться величина

$$\Theta^2 = \theta^2 + \frac{(\Delta u_m)^2}{12}. \quad (37)$$

Из записанных выше выражений следует несколько важных для кинетики испарения соотношений. Так, количество частиц, покидающих жидкость, равно

$$n = n_0 \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{1}{2}, \frac{U}{kT}\right). \quad (38)$$

Отсюда следует требуемая для (26) температурная зависимость: записывая в формуле (38) приближенное выражение для неполной гамма-функции через экспоненту, получаем

$$\frac{1}{n} \frac{dn}{dT} = \frac{U}{kT^2} \left(1 + \frac{1}{2} \frac{kT}{U}\right). \quad (39)$$

Из (39) следует, например, что для аргона при  $T \sim 100$  К изменение температуры на 1 К приводит к изменению числа испарившихся частиц на  $\sim 10\%$ .

Кроме того, из (39) вытекает некий аналог уравнения Клапейрона–Клаузиуса. Так как при интенсивном фазовом переходе давление в основном определяется числом частиц, то можно записать

$$\frac{1}{p} \frac{dp}{dT} \sim \frac{1}{n} \frac{dn}{dT}. \quad (40)$$

Считая в (39), что  $kT \ll 2U$ , можно пренебречь вторым слагаемым в скобке. Замечая, что энергия связи пропорциональна энтальпии парообразования,  $U \sim h_{lg}$ , из (39) получаем уравнение

$$\frac{d \ln p}{dT} \sim \frac{h_{lg}}{T^2}, \quad (41)$$

совпадающее с уравнением Клапейрона–Клаузиуса в области применимости уравнения состояния идеального газа.

Итак, с помощью выражения (39) можно определить зависимость массы, уносимой при испарении, от температуры, т.е. производную  $m_T = dm/dT$ , необходимую для формулы (26).

Из изложенной теории следует, что средняя энергия испарившихся частиц равна

$$\bar{\epsilon}_\Sigma = 2kT, \quad (42)$$

так как средняя кинетическая энергия частиц, соответствующая каждому из независимых направлений скорости вдоль поверхности жидкости, равна  $kT/2$ , что в сумме со средней энергией частицы вдоль нормали к поверхности  $kT$  дает (42). Этот результат показывает, что поток испарившихся частиц «перегрет» и, следовательно, тело, помещенное рядом с испаряющейся поверхностью, будет стремиться нагреться выше температуры  $T$ . Исходя из таких соображений, можно объяснить экспериментально наблюдаемый скачок температуры вблизи поверхности испарения [25].

Наконец, из общих результатов изложенной теории следует простое выражение для коэффициента испарения. Согласно распространенному способу описания испарения, плотность потока испарившихся  $j$  частиц выражается через коэффициент испарения  $\alpha$  и плотность потока Герца

$$j^H = \frac{1}{4} n_g \bar{v} = \frac{1}{4} n_g \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad (43)$$

по формуле

$$j = \alpha j^H. \quad (44)$$

Если использовать приближенное выражение (30) для функции распределения частиц вылетевших частиц по скоростям, то можно записать выражение для плотности потока вылетающих с поверхности жидкости частиц:

$$j = n_L \bar{v} = n_L \sqrt{\frac{\pi kT}{2m}}, \quad (45)$$

где  $n_L$  – число испарившихся частиц в единице объема, которое можно найти из равенства давлений, оказываемых потоком испаряющихся частиц и давлением газа с концентрацией частиц  $n_s$  над поверхностью жидкости. Отсюда следует, что

$$n_L = \frac{n_s}{4}, \quad (46)$$

и, следовательно, плотность потока испарившихся частиц

$$j = n_L \sqrt{\frac{\pi kT}{2m}} = \frac{\pi}{4} \frac{p}{\sqrt{2\pi m kT}} = \frac{\pi}{4} j^H. \quad (47)$$

Таким образом, коэффициент испарения оказывается равным

$$\alpha = \frac{\pi}{4} \approx 0.785. \quad (48)$$

Результаты аналитических вычислений подтверждаются численным моделированием методом молекулярной динамики.

Моделируется ансамбль частиц, взаимодействующих согласно потенциалу Леннарда–Джонса:

$$\varphi_{ij} = 4 \cdot \varepsilon_{ij} \cdot \left[ \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right]. \quad (49)$$

Моделируется испарение аргона, находящегося на медной подложке (см. рис. 21). Для взаимодействия атомов аргона и меди также используется потенциал (49) с параметрами, вычисляемыми по правилу Лоренца–Бертло:



$$\sigma_{ij} = \frac{\sigma_i + \sigma_j}{2}, \quad (50)$$

$$\varepsilon_{ij} = \sqrt{\varepsilon_i \varepsilon_j}. \quad (51)$$

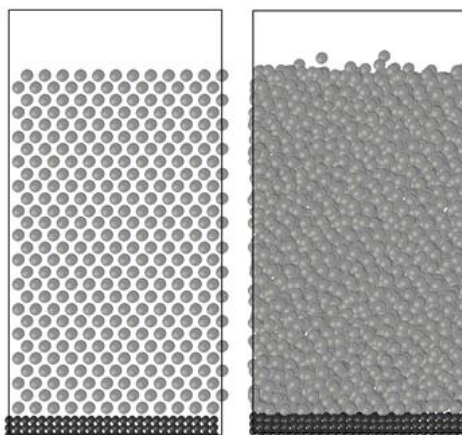


Рис. 21. Исходная конфигурация атомов аргона на медной подложке (ГЦК структура) и их конфигурация через 100 шагов по времени.

Численное моделирование производится с помощью известного метода Верле [2]. Граничные условия по боковым граням – периодические. Программа реализована с помощью технологии параллельного программирования CUDA.

Вначале система приводится в состояние равновесия (см. рис. 21) из заданной упорядоченной структуры атомов аргона, затем, при достижении состояния равновесия, исследуется процесс испарения. Корректность вычислений иллюстрируется рис. 22, где показаны расчетная кривая насыщения для аргона в сравнении со справочными данными NIST.

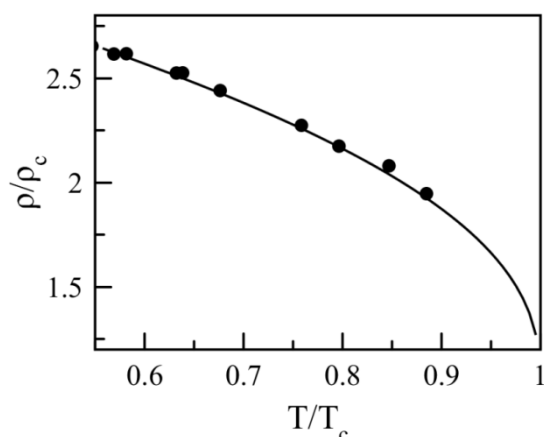


Рис. 22. Кривая насыщения для жидкого аргона: расчет (точки) в сравнении с экспериментальными данными NIST (линия).

В результате численного моделирования для состояния равновесия получены функции распределения различных энергий частиц аргона, которые сравниваются с формулами (32) для кинетической энергии, (31) для потенциальной энергии, (35) для полной энергии и (36) для лагранжиана. Результаты, представленные на рис. 23, можно признать вполне удовлетворительными.

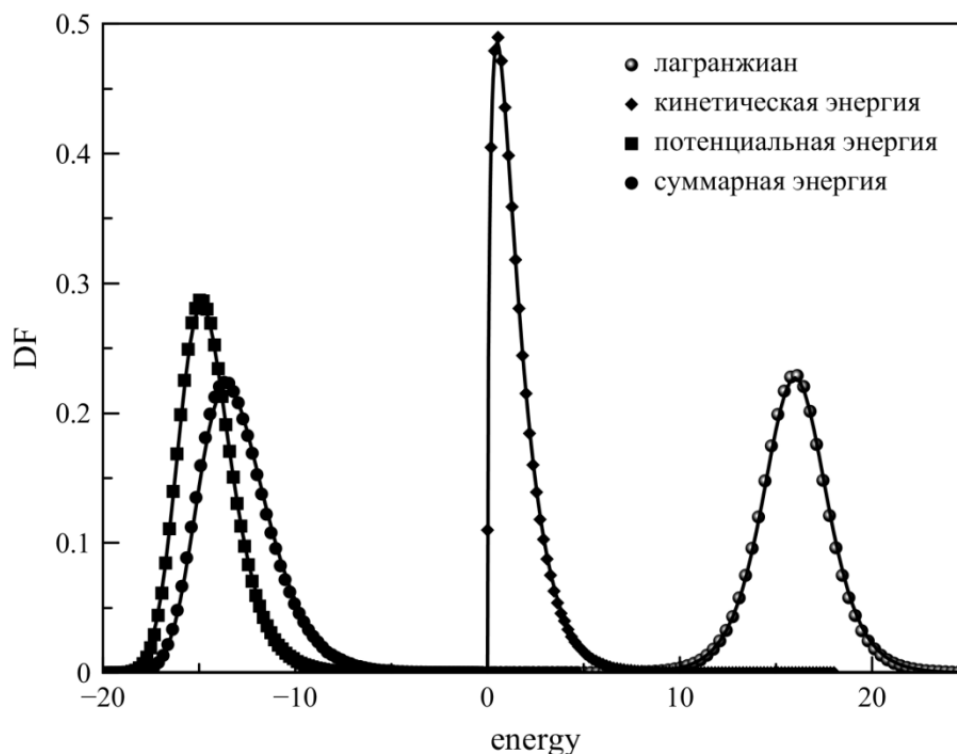


Рис. 23. Функции распределения по различным видам энергии: результаты численного моделирования (точки) в сравнении с аналитическими выражениями (31), (32), (35), (36)

При численном моделировании процесса испарения было показано, что и вблизи поверхности жидкости масвелловское распределение (32) выполняется с хорошей точностью. Таким образом, описанный выше механизм испарения может быть описан формулами; в частности, (28), (30), (38). Однако энергия связи атома на поверхности (потенциальная энергия с обратным знаком)  $\tilde{U} = -\tilde{u}$  сильно отличается от таковой внутри объема жидкости. На рис. 24 показано распределение по энергии связи в испаряющемся аргоне в зависимости от вертикальной координаты (координата 2 нм соответствует твердой подложке, поверхность жидкости – приблизительно 5.5 нм).

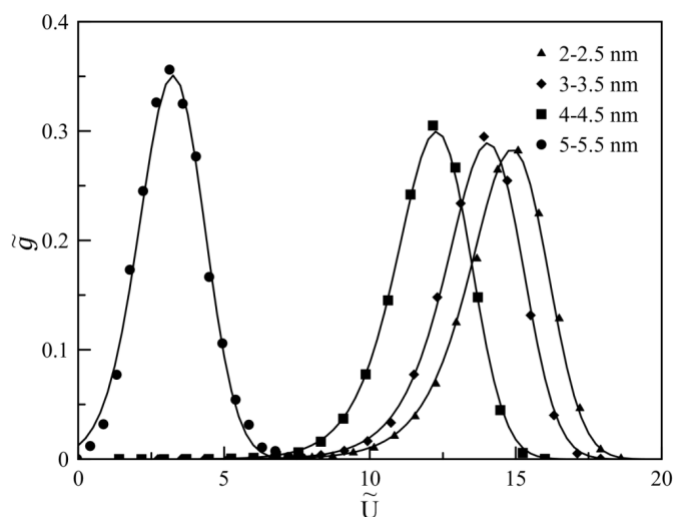


Рис. 24. Распределения по энергии связи для различной высоты (точки – численное моделирование, кривые – расчет по формуле (31))

Следовательно, энергия связи атома на поверхности в несколько раз меньше, чем в объеме. Вместе с тем, все представленные на рис. 24 результаты численных расчетов находятся в хорошем соответствии с аналитическим выражением (31). Допущение о равенстве  $\theta = T$  в выражении (33) приводит к отклонению корня из дисперсии, вычисляемой по формуле (37), от аналогичного значения, полученного в численном моделировании, на 10%, что находится в пределах неопределенности установления этой величины численными методами.

Численное моделирование позволяет также определить избыточный унос массы вследствие конденсации горячего пара на поверхности жидкости. Данный эффект может наблюдаться, например, при достижении температуры пара внутри коллапсирующей полости (в частности, при ее адиабатном сжатии) порядка  $\sim 10^3$  К, при таких температурах – несколько тысяч кельвин – в ответ на одну конденсирующуюся частицу будет вылетать с поверхности жидкости более одной испарившейся частицы [2]; границу кинетической энергии частицы, при которой начинается данный эффект, можно оценить по формуле

$$E_{\min}^* = 2U - E_l, \quad (52)$$

где  $E_l$  и  $U$  – кинетическая энергия атома в жидкости и ее энергия связи соответственно.

Подобный «нелинейный» эффект не описывается простой формулой Герца–Кнудсена, а вызванный им дополнительны приток массы газа в пузырь значительно затрудняет сам процесс схлопывания полости. Таким образом, объяснить свечение двухфазной, интенсивно кавитирующей среды с помощью теории, предполагающей высокий разогрев газа внутри схлопывающихся пузырей,

затруднительно. Вместе с тем, как было показано в предыдущих главах диссертации, природа гидродинамической люминесценции заключается в трибоэффектах; в этом смысле результаты четвертой главы коррелируют с экспериментальными результатами, изложенными в главах 2 и 3.

**В заключении** суммируются и обобщаются полученные в работе результаты.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Исследованы физические эффекты при течении жидкости в узких каналах. Известно, что протекание жидкости в тонком диэлектрическом канале сопровождается интенсивным излучением в оптическом диапазоне – гидродинамической люминесценцией. В данной диссертационной работе показано, что

1) гидролюминесценция – результат высвечивания отдельных молекул (азот, гидроксил) и атомов (водород, кислород) двухфазной среды; в случае течения масла сюда добавляется собственно высвечивание данного люминофора;

2) в условиях проведенных экспериментов – при давлении  $\sim 100$  атм на входе в канал диаметром 1 мм – колебательная температура молекул составляет  $\sim 4000\text{--}5000$  К, вращательная температура остается комнатной; данные факты свидетельствуют о неравновесности излучающей среды;

3) в условиях проведенных экспериментов распределение атомов по возбужденным уровням является сильно неравновесным; оценка температуры возбужденных атомов дает значения  $\sim 1$  эВ; вкупе с предыдущим результатом этот факт свидетельствует о возникновении сильно неравновесной плазмы внутри жидкости, протекающей сквозь узкий канал под большим давлением;

4) электризация жидкости сопровождается появлением разности потенциалов вдоль канала;

5) обобщая, причину возникновения плазмы можно свести к трибоэффектам, а само явление гидродинамической люминесценции может быть охарактеризовано как частный случай триболюминесценции.

Таким образом, источником гидродинамической люминесценции является плазма пузырьков, содержащихся внутри жидкости. В диссертации рассмотрены физические процессы, возникающие при динамике таких пузырьков. Показано, что в адиабатном приближении внутри колеблющегося пузырька возможно достижение высоких температур, что приводит к задаче об учете изменения массы газа внутри пузырька вследствие процесса испарения жидкости с его поверхности.

В свою очередь, данное обстоятельство потребовало рассмотрения задачи об интенсивном испарении, для которого в диссертации показано, что

1) выражения для потоков испарения с поверхности жидкости могут быть получены в виде аналитических выражений, следующих из атомистических представлений о выходе частицы из поверхностного слоя жидкости;

2) численное моделирование подтверждает результаты аналитических выкладок и приводит к заключению об увеличении массы газа внутри пузыря при конденсации горячего пара при температуре порядка  $\sim 10^3$  К.

Течение жидкости в системе узких каналов – фильтрация жидкости в пористой среде – в современной литературе описывается на различных уровнях: микроскопическом и макроскопическом. В данной работе используется второй вариант, приводящий к уравнению диффузии. В работе используется обобщение данного уравнения с дробной производной по времени переменного порядка. Порядок дифференцирования здесь зависит от искомой функции, что приводит к новому типу операторов, новым классам нелинейности и т.п. Помимо непосредственного приложения – к задачам фильтрации, для которых данный подход был предложен – подобные операторы могут быть использованы в различных иных физических приложениях.

## СПИСОК РАБОТ, ОПУБЛИКОВАННЫХ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. Biryukov D.A., Gerasimov D.N., Yurin E.I. Cavitation and Associated Phenomena. CRC Press, 2022. 380 p.
2. Gerasimov D.N., Yurin E.I. Kinetics of Evaporation. Springer, 2018. 321 p.
3. Biryukov D.A., Gerasimov D.N. Triboluminescence of Liquid Dielectrics: on a Way to Discover the Nature of Sonoluminescence// book chapter in “Triboluminescence: Theory, Synthesis, and Application”, ed. D.O. Olawale, O.O.I. Okoli, R.S. Fontenot, W.A. Hollerman. Springer, 2016. 454 p.
4. Смирнов С.Н., Герасимов Д.Н. Радиационная экология. Физика ионизирующих излучений. М.: Издательский дом МЭИ, 2006. 326 с.
5. Biryukov D.A., Gerasimov D.N., Morgunova S.B., Yurin E.I. Characterization of the electroluminescence of oil produced by an electric discharge// Anal. Lett. V. 56 (2023). P. 1102–1114.
6. Бирюков Д.А., Герасимов Д.Н., Юрин Е.И. Спектр излучения баллистического геля после пролета пули// Письма в ЖТФ. Т. 48 (2022). С. 14–16.
7. Gerasimov D.N. The Nernst–Einstein equation for an anomalous diffusion at short spatial scales// Physica D. V. 419 (2021). 132851.

8. Biryukov D.A., Gerasimov D.N., Ha Thi Thu Hoang, Yurin E.I. Non-equilibrium conditions in a luminescent medium during hydrodynamic luminescence of water// J. Lumin. V. 237 (2021). 118164.
9. Biryukov D.A., Gerasimov D.N., Yurin E.I. The cavitation process in proximity to an ultrasonic waveguide// J. Phys.: Conf. Ser. V. 1683 (2020). 022016.
10. Biryukov D.A., Gerasimov D.N., Yurin E.I. Molecular dynamics simulation of the Leidenfrost effect// J. Phys.: Conf. Ser. V. 1683 (2020). 022007.
11. Bocharov G.S., Gerasimov D.N., Grigoriev I.S., Dedov A.V., Zverev A.V., Eletskii A.V. Thermal conductivity of phase changing materials doped with carbon nanotubes// J. Phys.: Conf. Ser. V. 1683 (2020). 032011.
12. Gerasimov D.N., Morgunova S.B. Fast decomposition on proper vectors in multidimensional space// J. Phys.: Conf. Ser. V. 1683 (2020). 022015.
13. Gerasimov D.N., Morgunova S.B. Detecting chaos in time series// J. Phys.: Conf. Ser. V. 1683 (2020). 022014.
14. Belyaev I.A., Biryukov D.A., Gerasimov D.N., Yurin E.I. On-off intermittency and hard turbulence in the flow of fluid in the magnetic field// Chaos. V. 29 (2019). 083119.
15. Biryukov D.A., Gerasimov D.N. Spectroscopic diagnostics of hydrodynamic luminescence// J. Mol. Liq. V. 266 (2018). P. 75–81.
16. Tukhbatullin A.A., Sharipov G.L., Gerasimov D.N. Luminescence of reaction products of mechanochemical decomposition for some gaseous hydrocarbons  $C_xH_y$  during tribodestruction of cerium and terbium salts// J. Lumin. V. 197 (2018). P. 335–338.
17. Беляев И.А., Бирюков Д.А., Герасимов Д.Н. Спектроскопия кавитирующей жидкости в оптическом и рентгеновском диапазоне// Оптика и спектроскопия. Т. 125 (2018). С. 39–45.
18. Бирюков Д.А., Вальяно Г.Е., Герасимов Д.Н. Повреждения поверхности ультразвукового волновода при кавитации, сопровождавшейся сонолюминесценцией// Поверхность. Рентгеновские, синхротронные и нейтронные исследования. 2018. №2. С. 92–95.
19. Герасимов Д.Н., Юрин Е.И. Плотности потоков массы и энергии на поверхности испаряющейся жидкости// ТВТ. Т. 56 (2018). С. 372–380.
20. Gerasimov D.N., Yurin E.I. Potential energy distribution function and its application to the problem of evaporation// J. Phys.: Conf. Ser. V. 891 (2017). 012005.
21. Astafieva I.M., Gerasimov D.N., Makseev R.E. Density measurement by radiometric method with gamma irradiation from sources of low activity// J. Phys.: Conf. Ser. V. 891 (2017). 012322.

22. Бирюков Д.А., Герасимов Д.Н. Изменение температуры жидкости в процессе многопузырьковой сонолюминесценции// Тепловые процессы в технике. Т. 9 (2017). С. 113–117.
23. Бирюков Д.А., Герасимов Д.Н., Юрин Е.И. Вскипание жидкости при ее контакте с перегретой поверхностью// Тепловые процессы в технике. Т. 9 (2017). С. 397–404.
24. Бирюков Д.А., Герасимов Д.Н. Динамика интенсивности многопузырьковой сонолюминесценции// Письма в ЖТФ. Т. 43 (2017). С. 40–45.
25. Герасимов Д.Н., Юрин Е.И. Параметры, определяющие кинетические процессы на поверхности испарения// ТВТ. Т. 53 (2015). С. 530–537.
26. Бирюков Д.А., Герасимов Д.Н., Синкевич О.А. Электризация жидкости при сонолюминесценции// Письма в ЖТФ. Т. 40 (2014). С. 90–94.
27. Герасимов Д.Н., Юрин Е.И. Функция распределения атомов по скоростям при испарении жидкости// Т. 52 (2014). С. 377–384.
28. Бирюков Д.А., Власова М.И., Герасимов Д.Н., Синкевич О.А. Свечение жидкости в узком канале как триболюминесценция// Оптика и спектроскопия. Т. 114 (2013). С. 768–772.
29. Бирюков Д.А., Власова М.И., Герасимов Д.Н., Синкевич О.А. Электрическое поле внутри воздушного пузырька при гидродинамической люминесценции// ТВТ. Т. 51 (2013). С. 629–637.
30. Бирюков Д.А., Герасимов Д.Н., Синкевич О.А. Измерение и анализ спектра гидролюминесценции// Письма в ЖТФ. Т. 38 (2012). С. 53–57.
31. Gerasimov D.N., Kondratieva V.A., Sinkevich O.A. An anomalous non-self-similar infiltration and fractional diffusion equation// Physica D. V. 239 (2010). P. 1593–1597.
32. Герасимов Д.Н., Рудавина М.Н. Механизм вскипания жидкости в пузырьковой камере// ТВТ. Т. 46 (2008). С. 146–148.
33. Герасимов Д.Н., Синкевич О.А. Кипение: распределение пузырей по размерам, требуемое максимумом информации// ТВТ. Т. 42 (2004). С. 484–487.
34. Sinkevich O.A., Gerasimov D.N. Propagation of super-high-speed ionizing waves in long shielded tubes// J. Phys. D.: Appl. Phys. V. 33 (2000) P. 54–61.
35. Герасимов Д.Н., Синкевич О.А. Образование упорядоченных структур в термической пылевой плазме// ТВТ. Т. 37 (1999). С. 853–857.
36. Герасимов Д.Н., Синкевич О.А. Фазовые переходы и понижения порога электрического пробоя в газах с конденсированной дисперсной фазой// ТВТ. Т. 36 (1998). С. 357–361.