УДК 519.216 : 536.75

Р.Е. Бродский, Ю.П. Вирченко

МЕДЛЕННАЯ ФРАГМЕНТАЦИЯ ПРИ КВАДРАТИЧНОМ ЗАКОНЕ ДРОБЛЕНИЯ

1. Постановка проблемы и анализ публикаций. Фрагментация или измельчение хрупких твердотельных материалов является довольно распространённым природным и технологическим процессом. Процессы фрагментации протекают в широком диапазоне масштабов: получение порошков с микро- и наноразмерными частицами, дробление камней, фрагментация горных пород, образование реголита планет, ударная фрагментация космических тел.

Математическому описанию и моделированию фрагментации посвящён целый ряд исследований [1-4]. Основной целью работ в теории фрагментации является получение распределения вероятностей случайных размеров образующихся в результате измельчения материала фрагментов и его эволюция в продолжение процесса фрагментации. Наиболее интересным, с физической точки зрения, являются изучение однократной, ударной фрагментации, однако, этот процесс является очень зависимым от разнообразных условий его проведения. Поэтому, как правило, математическое моделирования фрагментации ограничивается изучением многократно повторяющихся актов измельчения материала в течение длительного промежутка времени, когда система фрагментов «теряет память» о начальном состоянии и, в результате, образуется некоторое финальное распределение вероятностей размеров фрагментов.

2. Цель статьи. Настоящая работа посвящена решению задачи, связанной именно с этим направлением исследований в теории фрагментации. Подход, используемый при решении этой задачи, основан на описании процесса дробления, предложенного в [1] и используемого многими авторами. Он связан с выбором единой для всех фрагментов, характеризующей их числовой характеристики, которая в дальнейшем называется размером. Состояние всей системы из N фрагментов в каждый момент времени описывается числовым набором $\rho_1 ... \rho_N$ их размеров. Механизм дробления, который определяет процесс фрагментации, предполагается масштабно инвариантным, то есть вероятность распада фрагмента с размером r на набор фрагментов с размерами $\{\rho_1 ... \rho_n\}$ является функцией отношений $\rho_1/r ... \rho_n/r$.

В работе решается задача об определении финального распределения вероятностей масштабно инвариантного процесса *медленной фрагментации*, которое понимается также в том же математическом смысле, что и в работах [1], [2]. Это асимптотика плотности распределения фрагментов по размеру при $t \to \infty$. Физическая приложимость этого распределения возможна в том случае, когда характерное время для поступления извне энергии существенно изменяющую систему фрагментов намного превосходит все другие времена, характерные для процесса фрагментации. Подчеркнем, что, несмотря на то, что всюду далее мы используем подход к описанию процесса фрагментации, принятый в классических работах [1], [2], существенным отличием нашего исследования является введение понятия медленного процесса фрагментации, которое разъясняется в следующем разделе.

3. Кинетическое уравнение медленной фрагментации. Рассматривая процесс фрагментации как последовательность отдельных актов дробления трёхмерного геометрического тела на несколько тел меньших размеров, в качестве единой характеристики размеров как исходного тела r, так и его осколков $\rho_1 ... \rho_n$, естественно считать их численно равными кубическим корням из объёмов соответствующих тел. Статистическое состояние системы фрагментов мы будем характеризовать плотностью $g(r,t)$ числа фрагментов размера r в момент времени t. Эволюционное уравнение для этой функции, записывается в виде так называемого кинетического уравнения [5]

$$\dot{g}(r,t) = \int_r^{\infty} K(r,\rho;t) g(\rho,t) d\rho - \mu(r,t) g(r,t). \qquad (1)$$

Здесь $K(r,\rho;t)$ – среднее число фрагментов размера r, образующихся в единицу времени за счёт распада одного фрагмента размера ρ, $\mu(r,t)$ – скорость распада фрагментов размера r. В общем случае, обе эти функции зависят от времени. В указанном выше случае медленной фрагментации это уравнение принимает вид уравнения типа Фоккера-Планка

$$\frac{\partial g(r,t)}{\partial t} = \gamma(r,t) g(r,t) + \frac{\partial}{\partial r}\big(a(r,t) g(r,t)\big) + \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\big(b^2(r,t) g(r,t)\big). \qquad (2)$$

Это связано с тем, что при медленном поступлении энергии в систему, большая часть актов дробления будет представлять собой «стирание» фрагментов – медленное уменьшение размера фрагментов за счёт откалывания от их поверхности малых, в сравнении с размером самого фрагмента, частиц, «пыли». Для остающихся крупных осколков размера r, образующихся при стирании фрагмента размера ρ выполняется соотношение

$$\delta = \rho - r << \rho,$$

и поэтому в этом приближении, естественно, удержать в правой части уравнения (1) только слагаемые, которые являются главными в пределе $\delta \to 0$, что соответствует так называемому «диффузионному приближению». Выполняя переход $\delta \to 0$ в (1), получим уравнение, имеющее вид диффузионного.

В уравнении (2) имеется три неопределенные функции – $a(r,t), b(r,t), \gamma(r,t)$. Для уменьшения степени неопределенности при построении эволюционной модели для системы фрагментов, необходимо воспользоваться законами сохранения полных объёма и энергии системы. Сохранение полного объема мы понимаем как наличие интеграла движения (см. [2])

$$V = \int_0^\infty g(r,t) \cdot r^3 dr = const \tag{3}$$

у конструируемой динамической системы. Воспользовавшись уравнением (2), находим, что для наличия такого интеграла движения, необходима следующая связь между коэффициентами уравнения (2):

$$r^2\gamma(r,t) - 3ra(r,t) + 3b^2(r,t) = 0 \tag{4}$$

Так как энергия $E(t)$, поступающая в систему в течение времени t, расходуется на разрыв связей между молекулами материала, то есть на образование новой поверхности, то, как принято в теории разрушения материалов, она должна быть пропорциональна площади этой поверхности. Этот факт мы выражаем следующим равенством (см. [2])

$$E(t) - E_0 = \alpha \int_0^\infty g(r,t) \cdot r^2 dr. \tag{5}$$

Здесь α – коэффициент пропорциональности между площадью поверхности и энергией, $E_0 = \alpha S_0$, где S_0 – начальная суммарная площадь поверхности фрагментов. Предполагается, что фрагменты, в основном, близки друг к другу по форме и не имеют сильной анизотропии в размерах (не иглы, не пластины), а значит их площадь поверхности пропорциональна r^2 с одним и тем же коэффициентом пропорциональности. Коэффициент, различающий формулы для площади поверхности шара, куба и других подходящих форм просто вносится в α. Преобразуя равенство, которое получается из последнего дифференцированием по времени с использованием уравнения (2), получим выражение для скорости поглощения системой внешней энергии вследствие процесса медленной фрагментации

$$r^2\gamma(r,t) - 2ra(r,t) + b^2(r,t) = [\alpha N(t)]^{-1} \dot{E}(t). \tag{6}$$

Характеристикой медленности поступлении энергии в систему является пренебрежимая малость правой части уравнения (6) по сравнению с левой. В этом случае, с использованием равенств (2) и (4), две функции из набора $a(r,t), b(r,t)$ выражаются через функцию $\gamma(r,t)$. В результате, кинетическое уравнение медленной фрагментации принимает вид

$$\frac{\partial g(r,t)}{\partial t} = \gamma(r,t)g(r,t) + \frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\gamma(r,t)g(r,t)\right) + \frac{1}{6}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(r^2\gamma(r,t)g(r,t)\right).$$

Нужно заметить, что пренебречь правой частью в уравнении (6) можно только в области размеров, много больших некоторого r_0, которое является решением уравнения

$$r_0^2\gamma(r,t) = 3[\alpha N(t)]^{-1} \dot{E}(t).$$

Для меньших значений r используемое приближение не применимо. Именно в эту область попадает «пыль», о которой было сказано выше. Однако, эта область с течением времени сужается до пренебрежимо малой окрестности нуля так, что при $t \to \infty$ мы имеем право использовать решение последнего кинетического уравнения на всей полуоси значений размеров. Цель нашей работы – определить финальную функцию распределения, в предположении, что при больших временах протекания процесса имеет место

$$\gamma(r,t) \to \gamma(t)c(r),$$

так, что вводя новую шкалу времени s на основе дифференциального соотношения $ds = \gamma(t)dt$, получим уравнение, не содержащее зависящих от времени параметров.

Можно показать, что поведение системы в случаях $c(r)\to 0$ и $c(r)\to c\neq 0$ при $r\to 0$ существенно различно. Второй случай соответствует наличию масштабной инвариантности в системе. Это так называемый «колмогоровский случай», функция распределения для него имеет логарифмически-нормальный вид. Наоборот, настоящая работа посвящена изучению первого из двух указанных случаев. В этом случае будем считать, что $c(r)=c_0 r^{\beta}$, $\beta>0$. Такого рода асимптотика коэффициента размножения $c(r)$ фрагментов в области малых размеров учитывает стохастические самоподобие механизма дробления. Таким образом, общее кинетическое уравнение медленной фрагментации в рассматриваемом неколмогоровском случае имеет вид

$$\frac{\partial g(r,s)}{\partial s}=r^{\beta}g(r,s)+\frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{\beta+1}g(r,s)\right)+\frac{1}{6}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(r^{2+\beta}g(r,s)\right), \tag{7}$$

в котором мы перешли к безразмерной переменной $r\to r_{безразм}\cdot c_0^{-1/\beta}$. Граничные условия для искомой плотности распределения имеют вид $rg(r,s)\to 0$ при $r\to 0$ и $r^4 g(r,s)\to 0$ при $r\to\infty$. Они связаны с требованием сходимости интегралов (3), (5).

4. Вычисление финальной плотности распределения. Будем искать решение кинетического уравнения (7) в виде $g(r,s)=r^{-\gamma}h(r,s)$,

$$r^{-\gamma}\frac{\partial h(r,s)}{\partial s}=r^{\beta-\gamma}h(r,s)+\frac{2}{3}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{\beta+1-\gamma}h(r,s)\right)+\frac{1}{6}\frac{\partial^2}{\partial r^2}\left(r^{2+\beta-\gamma}h(r,s)\right),$$

либо, в терминах новой безразмерной переменной $x=r^{-\beta/2}$, $\gamma=\beta+7/2$, $h=h(r(x),s)$,

$$\frac{\partial h}{\partial s}=\frac{\beta^2}{24}\cdot\frac{\partial^2 h}{\partial x^2}+\frac{\beta^2}{24x}\cdot\frac{\partial h}{\partial x}-\frac{h}{24x^2}\ .$$

Начально-краевая задача для этого уравнения решается преобразованием Лапласа по времени s, вводя функцию

$$H(r(x),\sigma)=\int_0^{\infty}e^{-\sigma s}h(r(x),s)ds.$$

В результате, для этой функции получается неоднородное уравнение

$$\frac{\beta^2}{24}\cdot\left(\frac{\partial^2 H(r(x),\sigma)}{\partial x^2}+\frac{1}{x}\cdot\frac{\partial H(r(x),\sigma)}{\partial x}-\left(\frac{1}{\beta^2 x^2}+\sigma\right)\cdot H(r(x),\sigma)\right)=-h(r(x),0)\ ,$$

общее решение которого выражается в терминах модифицированных функций Бесселя с показателем β^{-1}.

Рассмотрим случай, когда эволюция начинается с единственного исходного фрагмента. В этом случае начальная плотность распределения $g(r,0)$ выражается через δ-функцию,

$$h(r,0)=r^{\gamma}g(r,0)=R^{\beta+7/2}\delta(r-R),$$

где R – безразмерная величина исходного фрагмента. Кроме того, будем далее изучать только простейший частный случай, когда $\beta=2$ и, следовательно, модифицированные функции Бесселя выражаются через элементарные функции. Это позволяет получить явный вид для Лаплас-образа плотности распределения

$$H=\sqrt{\frac{2}{\pi}}(-6\sigma)^{-1/4}\sqrt{r}\left(A\sin\left(r^{-1}\sqrt{-6\sigma}\right)-B\cos\left(r^{-1}\sqrt{-6\sigma}\right)\right)+$$
$$+6(-6\sigma)^{-1/2}R^3\theta(R-r)\sqrt{r}\sin\left(\sqrt{-6\sigma}\left(R^{-1}-r^{-1}\right)\right),$$

где $\theta(\cdot)$ – функция Хевисайда, A и B – постоянные, подлежащие определению на основе граничных условий $r^{-9/2}H(r,\sigma)\to 0$ при $r\to 0$ и $r^{-3/2}H(r,\sigma)\to 0$ при $r\to\infty$. Очевидно, что для удовлетворения последнему граничному условию нужно положить $B=0$. Анализ асимптотики при $r\to 0$ выражения для функции H, на основе которого выбирается нужное значение постоянной A, приводит к следующей формуле

$$H = \left(6\sqrt{r}(-6\sigma)^{-1/2} R^3 \theta(R-r) \sin\left(\sqrt{-6\sigma} R^{-1}\right)\right) \exp\left(i r^{-1} \sqrt{-6\sigma}\right).$$

Выполняя обратное преобразование Лапласа

$$h(r,s) = -\frac{3\sqrt{r}}{2\pi i\sqrt{6}} R^3 \theta(R-r) \times$$

$$\times \int_{\varepsilon - i\infty}^{\varepsilon + i\infty} \sigma^{-1/2} \left[\exp\left(i\sqrt{-6\sigma} R^{-1}\right) - \exp\left(-i\sqrt{-6\sigma} R^{-1}\right)\right] \exp\left(i r^{-1}\sqrt{-6\sigma}\right) e^{\sigma s} d\sigma ,$$

после явного вычисления интеграла, находим

$$h(r,s) = \sqrt{6r/2s}\ \frac{\theta(R-r)R^3}{\Gamma(1/2)} \exp\left[-\frac{3}{2s}\left(r^{-2} + R^{-2}\right)\right] \mathrm{s}h\left[\frac{3}{sRr}\right].$$

Тогда финальная плотность распределения $g(r,s) = r^{-(11/2)} h(r,s)$ в пределе $R \to \infty$ представляется следующей асимптотической формулой:

$$g(r,s) = C(s) r^{-6} \exp\left[-\frac{3r_*^2}{2sr^2}\right],\ C(s) = 6\sqrt{\frac{3}{2\pi s^3}}\ R^2 r_*^3 \theta(R-r),$$

где произведен переход $r \Rightarrow r / r_*$ от безразмерной переменной к исходной переменной размера. В заключение заметим, что плотность $g(r,s)$ не является плотностью распределения вероятностей, так как она, по своему смыслу, нормирована на полное число фрагментов $N(t)$ в момент времени t.

Нами впервые получен закон распределения фрагментов по размеру со степенной, в отличие от [1], асимптотикой в области больших размеров. Такого рода финальный закон распределения наблюдался экспериментально (см. в [2] связанный с этим явлением анализ). Это сделано нами на основе общего подхода при построении модели, учитывающей прозрачным образом базовые физические условия протекания процесса фрагментации, отличные от тех, которые использовались в [1] – медленность протекания процесса фрагментации и стохастическое самоподобие механизма дробления.

ЛИТЕРАТУРА

1. Колмогоров А.Н. О логарифмически-нормальном законе распределения размеров частиц при дроблении / А.Н. Колмогоров // ДАН СССР. – 1941. – 31. – № 2. – С.99-101.
2. Сагдеев Р.З., Тур А.В., Яновский В.В. Формирование и универсальные свойства распределений по размерам в теории дробления / Р.З. Сагдеев, А.В. Тур, В.В. Яновский // ДАН СССР. – 1987. – 294. – №5. – С.1105-1110.
3. Вирченко Ю.П., Шеремет О.И. Геометрические модели статистической теории фрагментации / Ю.П. Вирченко, О.И. Шеремет // Теор. и мат. физика. – 2001.– 128. – № 2. – С.161-177.
4. Ziff R.M. An explicit solutions to a discrete fragmentation model / R.M. Ziff // J.Phys.A. – 1992. – 25. – P.2569-2576.
5. Virchenko Yu.P., Brodskii R.E. The Kolmogorov equation in the stochastic fragmentation theory and branching processes with infinite collection of particle types / Yu.P. Virchenko, R.E. Brodskii // Absract and Applied Analysis. – 2006. – Art.ID 36215. – P.1-10.

ВИРЧЕНКО Юрий Петрович - д.ф.-м.н., профессор, Белгородский государственный университет, зав. кафедрой теоретической и математической физики.

Научные интересы:

- математическая физика, статистическая физика, прикладная теория случайных процессов.

БРОДСКИЙ Роман Евгениевич – к.ф.-м.н., НИИ «Институт монокристаллов» НАНУ, м.н.с.

Научные интересы:

- статистическая физика, теория вероятностей.