

## МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

### О ГАЗОДИНАМИЧЕСКИХ ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ НА ФРОНТЕ ИСПАРЕНИЯ

© В.И.Мажукин, П.А.Прудковский, А.А.Самохин

Институт математического моделирования РАН  
Институт общей физики РАН

Анализируются математические модели, аппроксимирующие неравновесный кнудсеновский слой в испаренном веществе. Отмечаются недостатки имеющихся феноменологических моделей и вводятся критерии построения более точных соотношений на газодинамическом разрыве. Приводятся примеры формулировки граничных условий, удовлетворяющие накладываемым требованиям.

#### ABOUT GAS-DYNAMICAL BOUNDARY CONDITIONS ON EVAPORATION FRONT

*V.I.Mazhukin, P.A.Prudkovskii, A.A.Samokhin*

The mathematical models are analyzed, approximating the nonequilibrium knudsen layer in evaporated substance. The disadvantages of the existing phenomenological models are pointed out and the criterion for the construction of more precise relations on gas-dynamical discontinuities is introduced. The examples of such relations are formulated, which satisfy the requirements to be suggested.

Интенсивное поверхностное испарение является существенно неравновесным процессом. Кроме термодинамической неравновесности, в этом процессе имеется также газокинетическая неравновесность в тонком (кнудсеновском) слое пара, непосредственно примыкающем к поверхности раздела фаз. Газокинетическая неравновесность обусловлена потоком вещества через фазовую

границу. С ростом скорости испарения увеличивается массовый расход и соответственно увеличивается степень неравновесности процесса. Максимум неравновесности определяется максимальным значением потока массы, который, как известно, достигается при  $M = 1$ , где  $M = u/u_c$  — число Маха,  $u$  — газодинамическая скорость,  $u_c$  — скорость звука.

В условиях фазового равновесия, когда давление насыщенного пара  $p_s$  равно внешнему давлению, поток испаренного вещества уравнивается потоком возвращающихся частиц и суммарный поток вещества через границу раздела равен нулю. Распределение частиц пара по скоростям является равновесным и может быть описано максвелловской функцией с нулевой средней скоростью. В случаях, когда давление пара над поверхностью оказывается меньше давления насыщенного пара в системе конденсированная среда-пар формирует направленное движение с  $u > 0$ , при котором через фазовую границу протекает ненулевой поток вещества. Уменьшающийся при этом обратный поток приводит к отклонению распределения частиц от равновесного. С увеличением скорости испарения величина потока возвращающихся частиц падает, а функция распределения все больше отличается от максвелловской.

Для уравнений механики сплошной среды тонкий кнудсеновский слой представляет собой газодинамический разрыв, на котором должны выполняться законы сохранения массы, импульса, энергии и некоторые дополнительные соотношения, учитывающие специфику фазового перехода. Определить их можно зная функцию распределения внутри слоя.

В общем случае неравновесная функция распределения частиц находится из решения уравнения Больцмана в области с характерным размером в несколько длин свободного пробега. Решение кинетической задачи позволяет получить граничные условия для сшивки дифференциальных уравнений, описывающих поведение конденсированной и газовой сред.

Основным фактором сдерживающим широкое применение данного подхода оказывается то обстоятельство, что кинетическая задача, служащая для определения граничных условий, является составной частью другой проблемы макроскопического уровня, описываемой континуальными уравнениями. Необходимость одновременного рассмотрения разномасштабных задач, несмотря на все успехи развития современной компьютерной техники, сопряжена с дополнительными затруднениями и не всегда возможна. Заманчивым представляется альтернативный подход, позволяющий не решая кинетическую задачу, определять граничные условия сшивки при некоторых предположениях о виде неравновесной функции распределения. Однако, для получения физически обоснованных граничных условий, необходимо сформулировать основные критерии, которым эти условия должны удовлетворять.

Граничные условия на фронте испарения выводились различными спосо-

бами, см., например, [1-4] и цитированную там литературу. В данном сообщении отмечаются недостатки некоторых феноменологических моделей испарительного скачка и предлагаются способы их преодоления.

В ряде работ [5-7] для описания одномерного неравновесного потока частиц на внутренней стороне плоского кнудсеновского слоя используется составная функция распределения  $f = f^{(+)} + f^{(-)}$ , в которой распределение  $f^{(+)}$  для частиц, вылетающих с поверхности задается, как обычно, в виде максвелловской функции  $f_0(n_s, T_s)$  с концентрацией насыщенного пара  $n_s$ , при температуре поверхности  $T_s$ , а распределение  $f^{(-)}$  возвращающихся на поверхность частиц предполагается пропорциональным 'сдвинутой' максвелловской функции  $f(n, T, u)$  с концентрацией  $n$ , температурой  $T$  и средней скоростью  $u > 0$  установившегося потока пара на внешней стороне кнудсеновского слоя:

$$f^{(+)} = f_0(n_s, T_s) = f(n_s, T_s, 0), \quad V_z > 0 \quad (1)$$

$$f^{(-)} = \beta f(n, T, u) = \beta (m/2\pi kT)^{3/2} \exp\left(m \frac{V_x^2 + V_y^2 + (V_z - u)^2}{2kT}\right), \quad V_z < 0 \quad (2)$$

Вычисленные с помощью  $f^{(+)}$ ,  $f^{(-)}$  потоки массы, импульса и энергии  $g_i^{(+)} + g_i^{(-)}$ ,  $i = 1, 2, 3$  должны совпадать с их газодинамическими значениями  $g_i$ , определяемыми функцией  $f$ :

$$\begin{aligned} m \langle V_z \rangle &= g_1^{(+)} + g_1^{(-)} = g_1 = (mnu), \\ m \langle V_z^2 \rangle &= g_2^{(+)} + g_2^{(-)} = g_2 = nkT + mnu^2, \\ \frac{m}{2} \langle V^2 V_z \rangle &= g_3^{(+)} + g_3^{(-)} = g_3 = nu \left( \frac{mu^2}{2} + c_p T \right) \end{aligned} \quad (3)$$

где  $n$  - концентрация,  $m$  - масса частиц пара,  $c_p = k\gamma/(\gamma - 1)$  - теплоемкость пара при постоянном давлении в расчете на одну частицу,  $\gamma = 5/3$  для одноатомного пара.

Из уравнений (3) получаются газодинамические граничные условия на испарительном скачке, позволяющие, например, выразить  $n$ ,  $T$ , и  $\beta$  через  $n_s$ ,  $T_s$  и число Маха  $M = u(m/\gamma kT)^{1/2}$ , которое может служить характеристикой неравновесности (или интенсивности) процесса испарения.

При увеличении  $M$  от 0 до 1 параметр  $\beta$  в данной модели растет от 1 до 6,28, хотя обратные потоки  $g_i^{(-)}$ , вычисленные с помощью  $f^{(-)}$ (2), при этом уменьшаются по абсолютной величине (напомним, что  $g_1^{(-)}, g_3^{(-)} < 0 < g_2^{(-)}$ ). Такое поведение  $\beta$  свидетельствует об определенном недостатке подхода [5-7], который связан с неудачным выбором  $f^{(-)}$ . Качественное расхождение в поведении  $\beta$  и  $g_i^{(-)}$  обусловлено тем, что функция  $f(n, T, u)$  при отрицательных

скоростях  $V_z < 0$  убывает с ростом  $M$  гораздо быстрее, чем это требуется для адекватного описания зависимости  $g_i^{(-)}(M)$ .

Полные потоки  $g_1, g_2, g_3$  в зависимости от  $M$  имеют экстремумы соответственно при  $M = 0.88, 1.18$  и  $1.22$  со значениями  $g_1 = 0.820, g_2 = 0.549$  и  $g_3 = 0.912$ , если нормировать эти потоки на  $g_1^{(+)}, 2g_2^{(+)}$  и  $g_3^{(+)}$ , вычисленные с помощью (1):

$$g_1^{(+)} = n_s m (kT_s / 2\pi m)^{1/2}, \quad 2g_2^{(+)} = n_s kT_s, \quad g_3^{(+)} = 2n_s kT_s (kT_s / 2\pi m)^{1/2}$$

Между тем в рассматриваемой задаче выделенной точкой, т.е. точкой в которой все потоки имеют экстремумы, является  $M = 1$ , а не  $M = 0.88$  или  $M = 1.22$ , так что положения экстремумов при  $M = 1$  также могут служить свидетельством неудачного выбора  $f^{(-)}$  в модели [5-7].

Эти недостатки могут быть устранены при использовании более общего вида функции распределения для обратного потока частиц:

$$f^{(-)} = \beta f + \alpha f_1 \quad \alpha + \beta = 1 \quad (4)$$

где  $f_1 = f = f_0$  при  $M = 0$ , а при увеличении  $M$  функция должна убывать медленнее, чем  $f$ , чтобы обеспечить более естественное согласование поведения  $g_i^{(-)}$  и  $f^{(-)}$ .

Таким условиям удовлетворяет, например,  $f_1 = f_0$ . Параметры  $\alpha$  и  $\beta$  при этом оказываются положительными и  $\alpha, \beta < 1$ , однако положения экстремумов все еще отличаются от точки  $M = 1$ , хотя и приближаются к ней. Экстремальные значения потоков массы, импульса и энергии получаются равными:

$$g_1 = 0.87(M = 1.11), \quad g_2 = 0.56(M = 0.96), \quad g_3 = 0.88(M = 0.93).$$

Если же функцию  $f_1$  положить равной  $f_1 = f(n_1, T_1, u_1)$ , где величины  $n_1, T_1$  и  $u_1$  посредством дополнительных подгоночных параметров  $\epsilon$  и  $\delta$  выражаются через  $n, n_s, T, T_s$  и  $u$ :

$$\begin{aligned} n_1 T_1^{1/2} &= \epsilon n_s T_s^{1/2} + (1 - \epsilon) n T^{1/2}, \\ T_1^{1/2} &= \epsilon T_s^{1/2} + (1 - \epsilon) T^{1/2}, \\ u_1 &= \delta M (\gamma k T_1 / m)^{1/2} = \delta (T_1 / T)^{1/2} u, \end{aligned} \quad (5)$$

то, например, при  $\epsilon = 0.70$  и  $\delta = 0.32$  все три потока  $g_i$  будут иметь экстремумы при  $M = 1$  со значениями  $g_1 = 0.853, g_2 = 0.557, g_3 = 0.892$ . Отметим, что данный вариант выбора подгоночных коэффициентов не является, разумеется, единственным.

Строгая локализация экстремумов  $g_i$  в точке  $M = 1$  без использования подгоночных параметров получается для таких  $f^{(-)}$ , которые не содержат явной зависимости от газодинамических величин. Простейшим выражением, удовлетворяющим этому условию, является  $f^{(-)} = \alpha f_0$ . Однако такой выбор  $f^{(-)}$  оказывается неудовлетворительным, поскольку постоянное в данном случае отношение  $(g_3^{(+)} + g_3^{(-)}) / (g_1^{(+)} + g_1^{(-)}) = g_3^{(+)} / g_1^{(+)}$  не согласуется с точным равновесным пределом  $g_3 / g_1$  при  $M = 0$ . Для нормированных потоков величины этих отношений соответственно равны  $g_3^{(+)} / g_1^{(+)} = 1$  и  $g_3 / g_1 = 1.25$ .

Это расхождение устраняется при выборе  $f^{(-)}$  в виде:

$$f^{(-)} = \alpha^7 f_0(n_s, \alpha^2 T_s) \quad (6)$$

в котором учитывается уменьшение 'температуры'  $T_\alpha = \alpha^2 T$ , обратного потока частиц по сравнению с температурой поверхности  $T_s$ . За счет такого изменения  $T_\alpha$  отношение нормированных потоков  $g_3 / g_1$  перестает быть постоянным и принимает вид  $(1 - \alpha^{10}) / (1 - \alpha^8)$ , который обеспечивает правильное предельное значение 1.25 в равновесном случае  $\alpha = 1$ .

Параметр  $\alpha$  в (6) в отличие от параметра  $\beta$  из (2) с ростом числа Маха  $M$  уменьшается. Уравнение для  $\alpha$ , получаемое из равенства потоков (3), имеет достаточно простой вид

$$\frac{1 - \alpha^8(1 - \alpha^{10})}{(1 - \alpha^9)^2} = \frac{\pi \gamma^2 M^2 [(\gamma - 1)M^2 + 2]}{8 (\gamma - 1)(1 + \gamma M^2)^2} \quad (7)$$

Правая часть уравнения (7) имеет максимум при  $M = 1$ , чем и определяется локализация экстремумов  $\alpha$  и  $g_i$  в этой точке. Экстремальные значения потоков  $g_i(M = 1)$  соответственно равны  $g_1 = 0.85$ ,  $g_2 = 0.56$ ,  $g_3 = 0.90$ . Таким образом, предложенные здесь модели (5), (6) свободны от указанных выше недостатков варианта (2) [5-7]. Следует отметить, что подобные недостатки отсутствуют также и в модели [1], в которой используется единый аналитический вид неравновесной функции распределения с анизотропной температурой. Для  $g_i(M = 1)$  расчеты с помощью такой функции распределения дают соответственно  $g_1 = 0.84$ ,  $g_2 = 0.55$ ,  $g_3 = 0.88$ .

Выбор конкретной модели в рассмотренных выше случаях сравнительно слабо сказывается на величине потока импульса  $g_2$ , но заметно влияет на потоки массы  $g_1$  и энергии  $g_3$ . Зависимости нормированного отношения  $\bar{g}_3 / \bar{g}_1 = g_3 g_1^{(+)} / g_1 g_3^{(+)}$  от  $M$  для этих моделей показаны на рис.1. При  $M=1$  в случаях а (2), б (5), с (6) и д [1] величины нормированных потоков соответственно равны:  $g_1 / g_1^{(+)} = 0.816, 0.853, 0.848, 0.838$ ;  $g_2 / 2g_2^{(+)} = 0.55, 0.56, 0.55, 0.56$  и  $g_3 / g_3^{(+)} = 0.910, 0.892, 0.905, 0.884$ . Из поведения  $g_1, g_3$  следует, что вариант

(2) явно выпадает из совокупности других моделей из-за неудачного выбора  $f^{(-)}$ .

Численные значения  $n$  и  $T$ , нормированные на  $n_0$  и  $T_0$ , для  $M$  изменяющегося от нуля до единицы приведены в таблице 1. Эти данные, как и поведение потоков  $g_1, g_3$ , свидетельствуют о заметном отличии случая (2) от других моделей с более обоснованным выбором неравновесной функции распределения.

Таким образом, проведенный сравнительный анализ известных [1],[5-7] и вновь предложенных (5),(6) моделей испарительного газодинамического разрыва дает основания для вывода о том, что в модели (2) [5-7] величина  $T$  оказывается завышенной, а  $n$  - заниженной по сравнению с их истинными значениями на внешней стороне кнудсеновского слоя.

Таблица 1

M	Модель a,(2)		Модель b,(5)		Модель c,(6)		Модель d,[1]	
	T	n	T	n	T	n	T	n
0.0	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
0.1	0.960	0.861	0.958	0.864	0.960	0.869	0.953	0.861
0.2	0.922	0.748	0.916	0.753	0.920	0.758	0.910	0.749
0.3	0.886	0.654	0.876	0.662	0.881	0.666	0.870	0.658
0.4	0.851	0.576	0.837	0.587	0.844	0.588	0.833	0.582
0.5	0.817	0.511	0.799	0.525	0.808	0.524	0.798	0.519
0.6	0.785	0.457	0.763	0.472	0.773	0.470	0.763	0.466
0.7	0.754	0.410	0.727	0.428	0.740	0.424	0.730	0.421
0.8	0.724	0.371	0.693	0.391	0.705	0.386	0.697	0.384
0.9	0.696	0.337	0.660	0.360	0.672	0.355	0.665	0.352
1.0	0.669	0.308	0.628	0.333	0.640	0.328	0.633	0.326

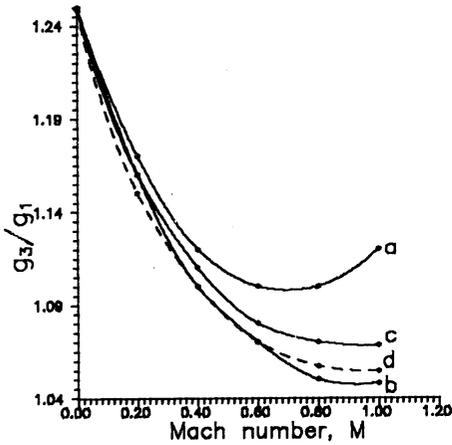


Рис.1 Зависимость нормированного отношения потока энергии к потоку массы  $\bar{q}_2/\bar{q}_1$  от числа Маха для различных моделей : а - модель (2), б - модель (5), с - модель (6), d - модель [1].

### Список литературы

1. *D.Croul*. An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monatomic gases // *J. Math. Physics*, 1936, V. 15, pp. 1 - 54.
2. *D.A.Labuntsov, A.P.Krukov*. Analysis of intensive evaporation and condensation // *Int. J. Heat Mass Transfer*, 1979, V. 22, pp. 989 - 1002.

3. *З. В.И.Мажукин, А.А.Самохин. Математическое моделирование фазовых переходов и образования плазмы при действии лазерного излучения на поглощающие среды. // Сб. Математическое моделирование. Нелинейные дифференциальные уравнения математической физики. – М.: Наука, 1987, с. 191-244.*
4. *А.А.Самохин. Фазовые переходы первого рода при действии лазерного излучения на поглощающие конденсированные среды.// Труды ИОФАН, N. 13. – М.: Наука, 1988, с. 3-98.*
5. *С.И.Анисимов. Об испарении металла,поглощающего лазерное излучение// ЖЭТФ, 1968, т. 54, N 1, с. 339 – 342.*
6. *Ю.З.Бубнов, М.Н.Либенсон. Анализ процесса движения дозвукового потока пара в квазизамкнутом объеме// ИФЖ, 1973, т. 25, N 3, с. 460-466.*
7. *C.J.Knight Theoretical Modeling of Rapid Surface Vaporization with Back Pressure// AIAA J., 1979, V. 17, N 5, pp. 81-86.*

Институт Математического Моделирования РАН  
Институт Общей Физики РАН

Поступила в редакцию  
05.07.93