

УДК 536.24

Приближенный кинетический анализ интенсивной конденсации

Ю.Б. Зудин

*Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»,
Москва*

E-mail: yzudin@gmail.com

Проведен приближенный кинетический анализ интенсивной конденсации на основе системы уравнений сохранения молекулярных потоков массы, импульса и энергии в слое Кнудсена. В качестве замыкающего соотношения использовалось условие сохранения потока конденсации между границей слоя Кнудсена и поверхностью перемешивания. Получено приближенное аналитическое решение задачи в виде зависимости отношения давлений от температурного отношения с числом Маха в качестве параметра. Аналитическое решение хорошо согласуется с результатами имеющихся численных расчетов.

Ключевые слова: кинетический анализ, интенсивная конденсация, слой Кнудсена, поток конденсации, поверхность перемешивания, аналитическое решение.

Введение

В последнее время возрос интерес к новым фундаментальным и прикладным проблемам, решение которых требует исследования интенсивных процессов фазового перехода — испарения и конденсации. Подобного рода задачи возникают при изучении многих процессов. При использовании лазерных методов обработки материалов важно знать закономерности как испарения — при термической лазерной абляции с поверхности мишени, так и конденсации — при взаимодействии с мишенью расширяющегося парового облака [1]. Некоторые аварийные ситуации в энергетике связаны с внезапным контактом массивов холодной жидкости и горячего пара. Ударное взаимодействие двух фаз вызывает импульсную волну разрежения в паре, сопровождающуюся резким изменением в нем давления и интенсивной конденсацией [2]. При воздействии солнечного излучения на поверхность кометы происходит испарение ее ледяного ядра с образованием атмосферы. В зависимости от расстояния до Солнца интенсивность испарения изменяется в широких пределах и может достигать огромных значений. Резко переменный во времени процесс испарения оказывает сильное влияние на плотность атмосферы кометы и характер ее движения [3].

При математическом моделировании интенсивных фазовых переходов граничные условия на поверхности конденсированной фазы определяются из решения кинетического уравнения Больцмана [4]. Уравнение Больцмана описывает течение внутри прилегающего к поверхности с газовой стороны слоя Кнудсена, имеющего толщину в несколько длин свободного пробега молекул. Линейная кинетическая теория, описывающая процессы испарения (конденсации) малой интенсивности и основанная

на линеаризованном уравнении Больцмана, в своем законченном виде представлена в работах [5, 6]. Фазовые переходы, в которых скорость пересекающей поверхность потока пара сравнима со скоростью звука, называют интенсивным испарением (интенсивной конденсацией). При интенсивных фазовых переходах влияние вязкости и теплопроводности на теплогидродинамику вырождается, и течение во внешней «эйлеровской области» за слоем Кнудсена описывается системой уравнений идеального газа [4].

Интенсивное испарение (интенсивная конденсация) характеризуется макроскопическими скачками параметров: температура, плотность и давление газа, используемые в качестве граничных условий для уравнений сплошной среды, не равны своим значениям на поверхности. В общем случае спектр молекул, эмитируемых поверхностью конденсированной фазы, существенно отличается от спектра молекул, падающих на нее из газовой области. Как следствие, функция распределения молекул по скоростям претерпевает разрыв на поверхности (микроскопический скачок), который монотонно сглаживается в пределах слоя Кнудсена и исчезает при достижении границы эйлеровской области.

Сложность кинетического анализа состоит в необходимости рассмотрения взаимосвязанных разномасштабных задач: микроскопической задачи — для уравнения Больцмана в слое Кнудсена, и макроскопической краевой задачи — для системы уравнений в эйлеровской области. Причем экстраполированные граничные условия для второй задачи должны определяться в результате решения первой.

К настоящему времени доказано [4–7], что строгий кинетический анализ возможен только на основе уравнения Больцмана. Показательна работа [8], в которой экстраполированные граничные условия для уравнений Эйлера выводились без использования уравнения Больцмана. Ее автор использовал изошренную математическую процедуру, включающую преобразование линеаризованного уравнения Больцмана в интегродифференциальное уравнение Винера–Хопфа, трансформацию его в матричную форму, факторизацию полученного матричного уравнения, исследование его на основе теоремы Гохберга–Крейна о самосопряженных матрицах. Однако в последующей работе [9] автор [8] выступил с опровержением своих результатов.

Невозможность микроскопического анализа без решения уравнения Больцмана не отменяет поиски макроскопических способов сопряжения эйлеровской области с поверхностью конденсированной фазы. Целью прикладного кинетического анализа является экстраполяция на поверхность решений уравнений Эйлера. Упрощенная постановка задачи допускает интегральное использование функции распределения вместо ее детального исследования [4]. Со своей стороны, генерируемые со все более высокой точностью численные решения уравнения Больцмана [10, 11] позволяют определять необходимые параметры функции распределения. Это дает возможность применять последние для эффективной валидации приближенных решений.

Целью настоящей работы является получение приближенного аналитического решения задачи интенсивной конденсации.

Макроскопические модели

Предметом кинетического анализа является трехмерная функция распределения молекул по скоростям $f = f(\mathbf{c})$, которая изменяется от равновесного максвелловского распределения в эйлеровской области

$$f_{\infty} = \frac{n_{\infty}}{\pi^{3/2} v_{\infty}^3} \exp \left(- \left(\frac{\mathbf{c} - \mathbf{u}_{\infty}}{v_{\infty}} \right)^2 \right) \quad (1)$$

до разрывной функции распределения на поверхности конденсированной фазы

$$c_z > 0: f_w = f_w^+, \quad (2)$$

$$c_z < 0: f_w = f_w^-. \quad (3)$$

Функция распределения эмитируемых поверхностью молекул f_w^+ задается в виде равновесного «полумаксвеллиана» при температуре поверхности T_w и давлении насыщения пара при этой температуре $p_w(T_w)$:

$$f_w^+ = \frac{n_w}{\pi^{3/2} v_w^3} \exp\left(-\left(\frac{\mathbf{c}}{v_w}\right)^2\right). \quad (4)$$

Здесь $n_\infty = p_\infty/kT_\infty$, $n_w = p_w/kT_w$ — молекулярные плотности газа соответственно на бесконечности и на поверхности конденсированной фазы, k — постоянная Больцмана; $\mathbf{c}, \mathbf{u}_\infty$ — векторы молекулярной и гидродинамической скорости соответственно; c_z — нормальная к поверхности составляющая молекулярной скорости; $v_\infty = \sqrt{2kT_\infty/m}$, $v_w = \sqrt{2kT_w/m}$ — тепловые скорости молекул на бесконечности и на поверхности конденсированной фазы соответственно.

Отметим, что физически правдоподобное соотношение (3) не имеет теоретического обоснования. Например, в работе [12] указано: «Сколько-нибудь серьезный теоретический вывод такого граничного условия нам неизвестен». Здесь же для определения спектра эмитируемых поверхностью молекул было выполнено численное моделирование испарения в вакуум методом молекулярной динамики. По результатам исследования был сделан вывод: «Таким образом, в случае малой плотности пара использование полумаксвелловского распределения в качестве граничного условия при решении газокинетических задач представляется разумным приближением».

Рассмотрим задачу испарения (конденсации) для полупространства покоящегося пара — одноатомного идеального газа. В одномерном случае вектор гидродинамической скорости \mathbf{u}_∞ вырождается в скалярную скорость испарения (конденсации) u_∞ . В стационарных условиях молекулярные потоки массы, импульса и энергии через любую параллельную поверхности плоскость будут равны. Используя граничное условие (1), можно выразить эти потоки через параметры течения на бесконечности и записать законы сохранения молекулярных потоков массы —

$$\int_{\mathbf{c}} m c_z f d\mathbf{c} = \rho_\infty u_\infty, \quad (5)$$

импульса —

$$\int_{\mathbf{c}} m c_z^2 f d\mathbf{c} = \rho_\infty u_\infty^2 + p_\infty, \quad (6)$$

и энергии —

$$\int_{\mathbf{c}} \frac{m c^2}{2} c_z f d\mathbf{c} = u_\infty \left(\frac{\rho_\infty u_\infty^2}{2} + \frac{5}{2} p_\infty \right). \quad (7)$$

Здесь $c^2 = c_x^2 + c_y^2 + c_z^2$ — квадрат модуля молекулярной скорости, c_x, c_y — проекции вектора молекулярной скорости соответственно на оси x, y , лежащие в параллельной поверхности плоскости, c_z — нормальная к поверхности компонента молекулярной скорости.

Интегрирование в левых частях уравнений (5)–(7) осуществляется по всему трехмерному пространству молекулярных скоростей: $-\infty < c_x < \infty$, $-\infty < c_y < \infty$, $-\infty < c_z < \infty$.

Для нахождения связей между параметрами течения на бесконечности, входящими в правые части уравнений (5)–(7), достаточно знать функцию распределения по скоростям на поверхности. Так как функция распределения отраженных молекул на поверхности f_w^+ уже известна из граничного условия (4), то для определения макроскопических граничных условий остается найти функцию распределения молекул, падающих на поверхность — f_w^- .

Перепишем систему уравнений (5)–(7) в более наглядном виде:

$$J_1^+ - J_1^- = \rho_\infty u_\infty, \quad (8)$$

$$J_2^+ - J_2^- = \rho_\infty u_\infty^2 + p_\infty, \quad (9)$$

$$J_3^+ - J_3^- = \frac{\rho_\infty u_\infty^3}{2} + \frac{5}{2} p_\infty u_\infty. \quad (10)$$

Здесь J_i^+ , J_i^- — соответственно эмитируемые поверхностью и падающие на поверхность молекулярные потоки; $i = 1, 2, 3$.

Как видно из уравнений (8)–(10), небаланс молекулярных потоков массы ($i = 1$), импульса ($i = 2$) и энергии ($i = 3$) на поверхности (левые части уравнений) приводит к появлению в эйлеровской области (правые части уравнений) макроскопических потоков испарения ($u_\infty > 0$ при $J_i^+ > J_i^-$) или конденсации ($u_\infty < 0$ при $J_i^+ < J_i^-$).

Величины J_i^+ рассчитываются стандартным образом [4] при подстановке функции $f = f_w^+$ из граничного условия (4) в подынтегральные выражения левых частей уравнений (5)–(7):

$$\left. \begin{aligned} J_1^+ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \rho_w v_w, \\ J_2^+ &= \frac{1}{4} \rho_w v_w^2, \\ J_3^+ &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \rho_w v_w^3. \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

Важно отметить принципиальное различие микроскопического и макроскопического подходов. В первом случае решение уравнения Больцмана с граничными условиями (1)–(4) определяет точную функцию распределения, обращающую уравнения сохранения в тождества. Во втором случае решается система уравнений (5)–(7) с неизвестной функцией распределения. Тогда величину f_w^- (точнее, ее отрицательную половину f_w^-) необходимо задавать из модельных представлений.

Интенсивное испарение

Предположим, что функция распределения падающих молекул описывается половиной равновесного максвелловского распределения (1) в эйлеровской области:

$$f_w^- = f_\infty^- \equiv f_\infty^-|_{c_z < 0}. \quad (12)$$

Гипотеза (12) физически означает, что спектр падающих молекул не изменяется в пределах всего слоя Кнудсена. Система уравнений (8)–(10) с учетом (11), (12) после некоторых преобразований может быть представлена в виде:

$$\sqrt{\tilde{T}}/\tilde{p} - I_1^- = 2\sqrt{\pi}\tilde{u}_\infty, \quad (13)$$

$$1/\tilde{p} - I_2^- = 2 + 4\tilde{u}_\infty^2, \quad (14)$$

$$1/(\sqrt{\tilde{T}}\tilde{p}) - I_3^- = \sqrt{\pi}\tilde{u}_\infty^3 + 5\sqrt{\pi}/2\tilde{u}_\infty. \quad (15)$$

Здесь $\tilde{u}_\infty \equiv u_\infty/v_\infty$ — скоростной фактор, связанный с числом Маха в эйлеровской области $M_\infty \equiv u_\infty(5kT_\infty/3m)^{-1/2}$ соотношением $\tilde{u}_\infty = \sqrt{5/6}M_\infty$. Безразмерные падающие молекулярные потоки на поверхности конденсированной фазы I_i^- записываются в виде:

$$\left. \begin{aligned} I_1^- &= \exp(-\tilde{u}_\infty^2) - \sqrt{\pi}\tilde{u}_\infty \operatorname{erfc}(\tilde{u}_\infty), \\ I_2^- &= 2\tilde{u}_\infty/\sqrt{\pi} \exp(-\tilde{u}_\infty^2) - (1 + 2\tilde{u}_\infty^2) \operatorname{erfc}(\tilde{u}_\infty), \\ I_3^- &= (1 + (\tilde{u}_\infty^2/2)) \exp(-\tilde{u}_\infty^2) - \sqrt{\pi}\tilde{u}_\infty/2(5/2 + \tilde{u}_\infty^2) \operatorname{erfc}(\tilde{u}_\infty). \end{aligned} \right\} \quad (16)$$

Здесь $\operatorname{erfc}(\tilde{u}_\infty)$ — дополнительный интеграл вероятностей.

Задача испарения позволяет определить зависимости от скоростного фактора \tilde{u}_∞ двух параметров: температурного отношения — $\tilde{T} = T_\infty/T_w$, и отношения давлений — $\tilde{p} = p_\infty/p_w$. Отсюда следует, что система уравнений (13)–(15) является переопределенной. Итак, допущение (12), исключающее изменение спектра молекул в слое Кнудсена, является слишком жестким и поэтому некорректно.

Макроскопическая теория интенсивного испарения впервые была представлена в основополагающей работе [13]. Анализируя предельный случай испарения, когда гидродинамическая скорость в эйлеровской области равна скорости звука, автор [13] предположил, что величина f_w^- пропорциональна отрицательной половине функции распределения в эйлеровской области (1):

$$f_w^- = \alpha f_\infty^- \equiv \alpha f_\infty|_{c_z < 0}. \quad (17)$$

Гипотеза (17) физически означает, что спектр молекул в слое Кнудсена претерпевает изменения за счет молекулярных столкновений. Таким образом, в работе [13] впервые были теоретически рассчитаны параметры звукового испарения для $M_\infty = 1$: $\tilde{T} \approx 0,669$, $\tilde{p} \approx 0,206$, $\alpha \approx 6,29$. Пионерская концепция работы [13] открыла новый класс кинетических задач и положила начало целому ряду публикаций. Аналогичный подход был применен в работе [14] и, независимо, в работе [15] для исследования всего диапазона изменения скорости испарения — $0 < M_\infty \leq 1$. Затем последовала серия работ, расчетные методики которых по существу различались лишь способом аппроксимации функции f_w^- .

Интенсивная конденсация

В отличие от случая испарения, при конденсации температурное отношение $\tilde{T} = T_\infty/T_w$ не является искомой величиной, а задается в качестве параметра. Целью задачи конденсации является определение зависимости $\tilde{p}(\tilde{u}_\infty)$ (или, что то же самое, $\tilde{p}(M_\infty)$) при $\tilde{T} = \text{idem}$.

В этом случае, чтобы избежать переопределенности системы уравнений (13)–(15), необходимо задавать сразу два свободных параметра.

В работе [16] для исследования интенсивной конденсации использовался численный метод, основанный на упрощающем интегрировании в пространстве молекулярных скоростей. Такой подход позволял определять связи параметров T, p, u_∞ , но воспроизводил не саму функцию распределения, а только ее некоторые моменты. В работах [17, 18] на основе численного исследования уравнения Больцмана проводился детальный анализ функции распределения, по результатам которого были рассчитаны профили плотности, температуры и давления в слое Кнудсена.

Задание температурного отношения \tilde{T} в качестве параметра фактически приводит к расщеплению задачи интенсивной конденсации на две самостоятельные физические задачи. В первой «нормальная» конденсация горячего газа на холодной поверхности ($\tilde{T} > 1$) отвечает привычным макроскопическим представлениям о физическом процессе.

Во второй «аномальная» конденсация холодного газа на горячей поверхности ($\tilde{T} < 1$) на самом деле допускается математическим описанием задачи. Аномальная конденсация реализуется, в частности, при испарении вещества в вакуум в процессе импульсной лазерной абляции [19]. После окончания лазерного импульса поверхность оказывается перегретой, а пар за счет адиабатического расширения в вакуум быстро охлаждается. В то же время конденсированная фаза охлаждается сравнительно медленно, в результате чего низкотемпературный пар начинает конденсироваться на высокотемпературной поверхности.

Модель перемешивания

Идея предлагаемой модели интенсивной конденсации базируется на элементарных кинетических представлениях. Как известно [4], уравнения сохранения молекулярных потоков являются результатом интегрирования функции распределения по всему векторному пространству молекулярных скоростей с весом 1, c , c^2 соответственно. Вследствие этого левые части уравнений (5)–(7) содержат величины, имеющие линейную по плотности размерность — соответственно ρv , ρv^2 , ρv^3 . В этом смысле оригинальная гипотеза (17) может быть интерпретирована как введение внутри слоя Кнудсена условной поверхности перемешивания " $\delta - \delta$ ". Плотность ρ_δ на этой поверхности связывается с плотностью ρ_∞ на внешней границе слоя Кнудсена коэффициентом пропорциональности $\rho_\delta = \alpha_\rho \rho_\infty$.

Ниже предлагается обобщение подхода работ [13, 14] на случай интенсивной конденсации. Предположим, что все три макроскопических параметра на поверхности перемешивания связаны со своими значениями на бесконечности соответствующими коэффициентами пропорциональности:

$$\rho_\delta = \alpha_\rho \rho_\infty, \quad v_\delta = \alpha_v v_\infty, \quad \tilde{u}_\delta = \alpha_u \tilde{u}_\infty. \quad (18)$$

Здесь $\tilde{u}_\delta = u_\delta / v_\delta$, $v_\delta = \sqrt{2kT_\delta / m}$ — соответственно скоростной фактор и тепловая скорость молекул на поверхности " $\delta - \delta$ "; α_ρ , α_v , α_u — коэффициенты, определяемые ниже. При известных значениях плотности и температуры давление на обеих этих поверхностях определяется из уравнения состояния идеального газа:

$$p_\infty = \rho_\infty k T_\infty / m, \quad (19)$$

$$p_\delta = \rho_\delta k T_\delta / m. \quad (20)$$

В результате мы имеем четыре неизвестных — $\tilde{p}, \alpha_\rho, \alpha_v, \alpha_u$ — для трех уравнений — (13)–(15). Для замыкания математического описания задачи будем искать дополнительную связь между параметрами на поверхности " $\delta - \delta$ ".

Зафиксируем трехмерную функцию распределения (1) на границе слоя Кнудсена " $\infty - \infty$ " (т.е. фактически на бесконечности) в плоскостях $c_x = c_y = 0$ и нормируем ее на максимальное значение. Такая приведенная одномерная функция распределения будет иметь вид:

$$\tilde{f}_\infty = \exp\left(-(\tilde{c}_z - \tilde{u}_\infty)^2\right), \quad (21)$$

где $\tilde{c}_z = c_z/v_\infty$ — безразмерная нормальная скорость молекул. Примем, что внутри слоя Кнудсена отрицательная половина функции \tilde{f} будет деформироваться в эллипсоидальное распределение вида:

$$\tilde{f}^- \equiv \tilde{f}|_{c_z < 0} = \exp\left(-(\varepsilon \tilde{c}_z - \tilde{u})^2\right). \quad (22)$$

Здесь введены следующие локальные величины: ε — параметр эллипсоидальности, $\tilde{c}_z = c_z/v$, $\tilde{u} = u/v$, где c_z, u — соответственно молекулярная и гидродинамическая скорости¹, $v = \sqrt{2kT/m}$ — тепловая скорость молекул, соответствующая локальной температуре T .

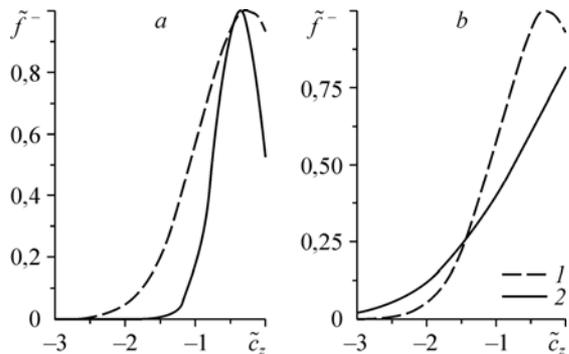
На рис. 1 приведены зависимости $\tilde{f}^-(\tilde{c}_z)$ на поверхности конденсированной фазы, взятые из рис. 9 работы [17] (линия 2). В этой же работе приводятся следующие расчетные значения параметров эллипсоидальности:

- для аномальной области ($\tilde{T} = 0,2, \tilde{p} = 2$): $\varepsilon_w = 2,11, \tilde{u}_w = -0,801$;
- для нормальной области ($\tilde{T} = 4, \tilde{p} = 2$): $\varepsilon_w = 0,5, \tilde{u}_w = 0,45$.

На границе слоя Кнудсена, согласно (21), для всего диапазона изменения температурного отношения ($0 < \tilde{T} < \infty$) имеем $\varepsilon_\infty = 1$. Величина $\tilde{u}_\infty \equiv \sqrt{5/6} M_\infty$ в (21) определялась графически с помощью рис. 11 работы [17] для заданных значений \tilde{p}, \tilde{T} . Для аномальной области было получено $\tilde{u}_\infty \approx -0,26$, для нормальной области — $\tilde{u}_\infty \approx -0,274$. Функции распределения (21) также приведены на рис. 1 (линия 1).

Рис. 1. Зависимость приведенной функции распределения из работы [17] (fig. 9a, c) от безразмерной молекулярной скорости.

Ветви конденсации: *a* — аномальная при $\tilde{p} = 2, \tilde{T} = 0,2$, *b* — нормальная при $\tilde{p} = 2, \tilde{T} = 4$; 1 — граница слоя Кнудсена с эйлеровской областью, 2 — поверхность конденсированной фазы.



¹ Строго говоря, понятие гидродинамической скорости к слою Кнудсена неприменимо, поэтому \tilde{u} правильнее называть вторым, наряду с ε , параметром эллипсоидальности.

Рисунок 1 демонстрирует нарастание неравновесности спектра падающего молекулярного потока по мере его приближения внутри слоя Кнудсена к поверхности. При этом деформация функции распределения происходит различно для разных ветвей конденсации. При $\tilde{T} < 1$ функция \tilde{f}^- становится более крутой, сохраняя первоначальный гидродинамический сдвиг — $\tilde{u} < 0$ (рис. 1a); при $\tilde{T} > 1$ наблюдается обратная картина: функция \tilde{f}^- становится более «размазанной», а ее сдвиг меняется на противоположный — $\tilde{u} > 0$ (рис. 1b), характерный для процесса испарения [13–15].

Для поиска дополнительного «условия перемешивания» запишем выражение для массового потока газа на бесконечности j_∞ , стоящего в правой части уравнения (5):

$$j_\infty \equiv \rho_\infty u_\infty = u_\infty \cdot \int_{\substack{-\infty < c_x < \infty \\ -\infty < c_y < \infty \\ -\infty < c_z < \infty}} m f_\infty d\mathbf{c}. \quad (23)$$

Интегрирование в (23) производится в пределах от $-\infty$ до $+\infty$ по всем трем компонентам вектора молекулярной скорости \mathbf{c} : параллельным к поверхности — c_x, c_y , и нормальной к ней — c_z . Будем теперь интегрировать только по отрицательному полупространству нормальной компоненты c_z ($-\infty < c_z < 0$), а интегрирование по компонентам c_x, c_y оставим без изменений. Тогда мы получим поток конденсации — составляющую молекулярного потока, направленную к конденсированной фазе:

$$j_\infty^- = u_\infty \cdot \int_{\substack{-\infty < c_x < \infty \\ -\infty < c_y < \infty \\ -\infty < c_z \leq 0}} m f_\infty^- d\mathbf{c}. \quad (24)$$

Стоящая под знаком интеграла (24) отрицательная половина функции распределения на бесконечности f_∞^- определяется соотношением (1), записанным для области $c_z < 0$. Аналогичным образом можно определить поток конденсации на поверхности " $\delta - \delta$ ":

$$j_\delta^- = u_\delta \cdot \int_{\substack{-\infty < c_x < \infty \\ -\infty < c_y < \infty \\ -\infty < c_z \leq 0}} m f_\delta^- d\mathbf{c}. \quad (25)$$

Здесь половина функции распределения f_δ^- на поверхности перемешивания определяется соотношением:

$$f_\delta^- \equiv f_\delta|_{c_z < 0} = \frac{n_\delta}{\pi^{3/2} v_\delta^3} \exp\left(-\left(\frac{\mathbf{c} - \mathbf{u}_\delta}{v_\delta}\right)^2\right). \quad (26)$$

Для замыкания математического описания задачи примем простое физическое допущение: в процессе перераспределения спектра молекул поток конденсации остается неизменным. Тогда получим искомое условие перемешивания, связывающее молекулярные потоки на поверхностях " $\infty - \infty$ " и " $\delta - \delta$ ":

$$j_\infty^- = j_\delta^-. \quad (27)$$

Перечислим основные моменты модели перемешивания:

– жесткое задание на поверхности эйлеровской функции распределения (12) приводит к переопределенности системы уравнений сохранения молекулярных потоков, поэтому допущение (12) некорректно;

- гипотеза (17) вводит в математическое описание необходимый свободный параметр и позволяет успешно решить задачу испарения [13, 14];
- модель перемешивания, основанная на гипотезе (18), обобщает оригинальный подход [13] на случай конденсации;
- для замыкания задачи используется условие сохранения потока конденсации (27).

Результаты решения

Система уравнений (8)–(10), (18), (27) представляет собой замкнутое описание задачи интенсивной конденсации. Эта система после некоторых преобразований приводится к виду:

$$\sqrt{\tilde{T}}/\tilde{p} - \alpha_\rho \alpha_v K_1^- = 2\sqrt{\pi} \tilde{u}_\infty, \quad (28)$$

$$1/\tilde{p} - \alpha_\rho \alpha_v^2 K_2^- = 2 + 4\tilde{u}_\infty^2, \quad (29)$$

$$1/(\sqrt{\tilde{T}} \tilde{p}) - \alpha_\rho \alpha_v^3 K_3^- = \sqrt{\pi} \tilde{u}_\infty^3 + 5\sqrt{\pi}/2 \tilde{u}_\infty, \quad (30)$$

$$\operatorname{erfc}(\tilde{u}_\infty) = \alpha_\rho \alpha_v \alpha_u \operatorname{erfc}(\alpha_u \tilde{u}_\infty), \quad (31)$$

отсюда можно найти коэффициенты α_ρ , α_v , α_u в соотношении (18). Безразмерные молекулярные потоки K_i^- ($i = 1, 2, 3$), падающие на поверхность перемешивания, записываются в виде:

$$\left. \begin{aligned} K_1^- &= \exp(-\tilde{u}_\delta^2) - \sqrt{\pi} \tilde{u}_\delta \operatorname{erfc}(\tilde{u}_\delta), \\ K_2^- &= \frac{2\tilde{u}_\delta}{\sqrt{\pi}} \exp(-\tilde{u}_\delta^2) - (1 + 2\tilde{u}_\delta^2) \operatorname{erfc}(\tilde{u}_\delta), \\ K_3^- &= \left(1 + \frac{\tilde{u}_\delta^2}{2}\right) \exp(-\tilde{u}_\delta^2) - \frac{\sqrt{\pi} \tilde{u}_\delta}{2} \left(\frac{5}{2} + \tilde{u}_\delta^2\right) \operatorname{erfc}(\tilde{u}_\delta). \end{aligned} \right\} \quad (32)$$

Функции K_i^- следуют из функций I_i^- , определяемых уравнениями (16), при замене в последних $\tilde{u}_\infty \Rightarrow \tilde{u}_\delta \equiv \alpha_u \tilde{u}_\infty$. Уравнения (28)–(30) получаются в результате вычисления молекулярных потоков, стоящих в левых частях уравнений (8)–(10), с использованием соответствующих функций распределения. Эмитируемые поверхностью потоки J_i^+ рассчитываются с помощью равновесного полумаксвеллиана f_w^+ на поверхности конденсированной фазы (формула (4)). Для определения падающих на поверхность потоков J_i^- используется смещенный полумаксвеллиан f_δ^- на поверхности перемешивания (формула (26)).

Система уравнений (28)–(32) решалась с помощью программного пакета системы компьютерной алгебры Maple 11. При проведении расчетов следует иметь в виду, что для случая конденсации число Маха в эйлеровской области изменяется в диапазоне $-1 \leq M_\infty < 0$.

Это соответствует изменению скоростного фактора в диапазоне $-\sqrt{5/6} \leq \tilde{u}_\infty < 0$. На рис. 2 приведено сопоставление результатов расчета с результатами численного исследования [17]. Интересно отметить, что расчетные кривые $\tilde{p}^{-1}(\tilde{T})$ проходят через максимум в окрестности точки сопряжения $\tilde{T} = 1$ двух ветвей конденсации — нормальной и аномальной (слегка отклоняясь от этой точки влево).

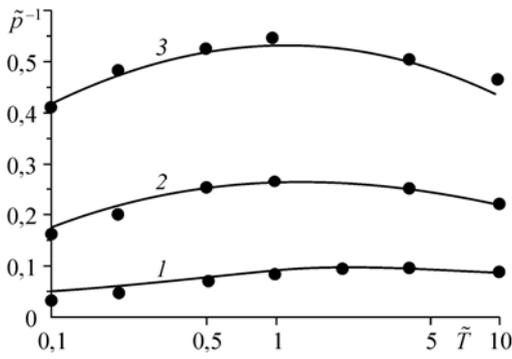


Рис. 2. Зависимость обратного отношения давлений при интенсивной конденсации от температурного отношения.
Символы — численные результаты [17]; расчет по системе уравнений (28)–(31):
 $M_\infty = -1$ (1), $-0,6$ (2), $-0,3$ (3).

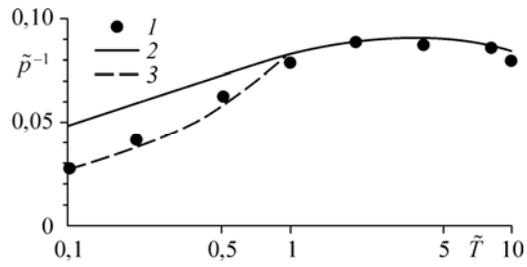


Рис. 3. Зависимость обратного отношения давлений для звуковой конденсации ($M_\infty = -1$) от температурного отношения.
1 — численные результаты [17], 2 — расчет по системе уравнений (28)–(31),
3 — расчет по соотношению (35).

На микроскопическом уровне модель перемешивания, в которой принципиально не используется уравнение Больцмана, даже качественно не воспроизводит численную эволюцию функции распределения (рис. 1). Тем не менее, на макроскопическом уровне наблюдается хорошее согласование приближенной аналитической зависимости $\tilde{p}(\tilde{T}, M_\infty)$ с ее точным численным прообразом. Сглаживание микроскопических неточностей функции распределения при переходе к экстраполированным граничным условиям подтверждает эффективность представленного в [13] теоретического метода. Об этом же свидетельствует вывод работы [17] о том, что «даже грубое приближение функции распределения по скоростям в кнудсеновском слое может обеспечить удовлетворительное аналитическое описание газодинамических условий».

Рассмотрим теперь более детально режим звуковой конденсации (кривая 1 на рис. 2). Как видно из рис. 3, расчет хорошо описывает зависимость $\tilde{p}^{-1}(\tilde{T})$ для нормальной ветви ($\tilde{T} > 1$), однако заметно завышает значения \tilde{p}^{-1} для аномальной ветви ($\tilde{T} < 1$). Возможной причиной этого расхождения может быть неучет эффекта запирания парового потока при достижении им скорости звука на поверхности " $\delta - \delta''$ ".

Проведя расчет числа Маха $M_\delta \equiv u_\delta (5kT_\delta/3m)^{-1/2}$ на поверхности перемешивания для случая звуковой конденсации, получаем следующие результаты (рис. 4):

- для нормальной конденсации течение является дозвуковым ($\tilde{T} > 1: |M_\delta| < 1$);
- для аномальной конденсации течение является сверхзвуковым ($\tilde{T} < 1: |M_\delta| > 1$);
- в точке сопряжения нормальной и аномальной ветвей конденсации течение является звуковым ($\tilde{T} = 1: |M_\delta| = 1$).

Это означает, что при своем движении от границы слоя Кнудсена к поверхности перемешивания паровой поток

- замедляется и становится дозвуковым при $\tilde{T} > 1$;
- ускоряется и становится сверхзвуковым при $\tilde{T} < 1$;
- остается звуковым при $\tilde{T} = 1$.

Вопрос устойчивости стационарной сверхзвуковой конденсации в настоящее время является дискуссионным. Так, авторы работ [16, 17] допускают сверхзвуковую конденсацию для определенных областей параметров, а в работах [20, 21] утверждается, что

Рис. 4. Зависимость числа Маха на поверхности перемешивания при звуковой конденсации ($M_\infty = -1$) от температурного отношения.



при сверхзвуковой конденсации перед поверхностью образуется ударная волна, возвращающая течение из сверхзвукового обратно в звуковой.

Примем, что гидродинамическая скорость на поверхности перемешивания не может превышать скорости звука: $|M_\delta| \leq 1$. Физически это предположение сводится к условию запирания потока для ветви аномальной конденсации:

$$\tilde{T} \leq 1: M_\infty = M_\delta = -1. \quad (33)$$

Из (33) следует, что в аномальной области $\tilde{T} \leq 1$ все параметры падающего молекулярного потока между границей слоя Кнудсена и поверхностью перемешивания сохраняются неизменными:

$$\alpha_\rho = \alpha_v = \alpha_u = 1. \quad (34)$$

Использование условий (33), (34) приводит к следующим результатам для области аномальной конденсации:

- уравнение сохранения потока конденсации (31) обращается в тождество;
- уравнения сохранения молекулярных потоков массы (28), импульса (29) и энергии (30) дают три различные зависимости $\tilde{p}(\tilde{T})$;
- из вырожденного уравнения энергии (30) следует соотношение:

$$\tilde{p} \approx 11,7 / \sqrt{\tilde{T}}. \quad (35)$$

Как видно из рис. 3, рассчитанная по формуле (35) зависимость $\tilde{p}^{-1}(\tilde{T})$ хорошо описывает численные результаты для звуковой конденсации при $\tilde{T} < 1$. Здесь важно подчеркнуть, что в численном исследовании [17] собственно звуковой режим не достигался. Последнему предзвуковому расчетному режиму отвечало $M_\infty \approx -0,95$. Точки для $M_\infty = -1$ во всем интервале ($0,1 < \tilde{T} < 10$) на рис. 3 были получены в работе [17] экстраполяцией сглаженных численных кривых, что могло приводить к определенным погрешностям. Интересно отметить, что в работе [18], фактически повторяющей оригинальный анализ [17] для случая полиатомного газа, расчеты также доводились до предзвукового режима $M_\infty \approx -0,97$. Таким образом, модель перемешивания, представленная системой уравнений (28)–(35), позволяет получить хорошее количественное описание зависимости отношения давлений \tilde{p} от температурного отношения \tilde{T} при интенсивной конденсации.

Дальнейшее развитие модели может состоять в построении функции распределения падающих на поверхность молекулярных потоков в фиксированных точках внутри слоя Кнудсена. Конкретно это может сводиться к последовательному выстраиванию поверхностей перемешивания с определенным шагом вплоть до достижения поверхности конденсированной фазы. На первом этапе целесообразно преобразовать максвелловскую функцию распределения (26) в эллипсоидальное распределение вида (21) и ввести таким образом параметр эллипсоидальности $\varepsilon \neq 1$.

По-видимому, такая процедура идейно близка численным методам дискретизации уравнения Больцмана по поперечной координате [22]. Известно, что при использовании стандартных разностных схем второго порядка аппроксимации возникают трудности, связанные с воспроизведением разрыва функции распределения на поверхности. В то же время модель перемешивания, несмотря на свой приближенный характер, изначально свободна от этого недостатка. Осуществление такой программы требует специального весьма трудоемкого исследования, успех которого заранее далеко не очевиден.

Заключение

Представлена приближенная модель интенсивной конденсации (модель перемешивания), использующая систему уравнений сохранения молекулярных потоков массы, импульса и энергии в слое Кнудсена. Модель перемешивания представляет собой дальнейшее развитие основополагающей концепции работы [13]. В качестве замыкающего соотношения модели использовано условие сохранения потока конденсации между границей слоя Кнудсена и поверхностью перемешивания. Получено приближенное аналитическое решение задачи интенсивной конденсации в виде зависимости отношения давлений от температурного отношения с числом Маха в качестве параметра. Для анализа конденсации со звуковой скоростью течения газа использовано условие запираания газового потока на поверхности перемешивания. Проведено сопоставление полученного аналитического решения с результатами имеющихся численных расчетов. Намечено направление возможного дальнейшего развития предложенной аналитической модели.

Обозначения

\mathbf{c} — вектор молекулярной скорости,	M — число Маха,
c_x, c_y — проекции вектора молекулярной скорости на оси x, y , параллельные поверхности,	n — молекулярная плотность газа,
c_z — нормальная к поверхности компонента молекулярной скорости,	p — давление,
f — функция распределения,	\bar{p} — отношение давлений,
I, K — безразмерные молекулярные потоки,	T — температура,
J — молекулярный поток,	\tilde{T} — температурное отношение,
j — массовый поток,	u — гидродинамическая скорость,
k — постоянная Больцмана,	\mathbf{u} — вектор гидродинамической скорости,
m — масса молекулы,	\tilde{y} — скоростной фактор,
	v — тепловая скорость молекул.

Греческие символы

$\alpha_\rho, \alpha_v, \alpha_u$ — неизвестные коэффициенты, определяемые из решения системы уравнений (28)–(31),	ρ — плотность,
	ε — параметр эллипсоидальности.

Верхние индексы

«+» — молекулярный поток, эмитируемый поверхностью конденсированной фазы,
«-» — молекулярный поток, падающий на поверхность конденсированной фазы.

Нижние индексы

w — поверхность конденсированной фазы,	1 — поток массы,
δ — поверхность перемешивания,	2 — поток импульса,
∞ — бесконечность,	3 — поток энергии.

Список литературы

1. Mazhukin V.I., Mazhukin A.V., Demin M.M., Shapranov A.V. The dynamics of the surface treatment of metals by ultra-short high-power laser pulses // Surface Modification Technologies XXVI (SMT 26) / Eds T.S. Sudarshan, M. Jeandin, V. Firdirici. 2013. Vol. 26. P. 557–566.

2. **Lezhnin S.I., Kachulin D.I.** The various factors influence on the shape of the pressure pulse at the liquid-vapor contact // J. of Engineering Thermophysics. 2013. Vol. 22, No. 1. P. 69–76.
3. **Захаров В.В., Крифо Ж.Ф., Лукьянов Г.А., Родионов А.В.** О моделировании сложных неравновесных течений газа в широком диапазоне чисел Кнудсена на примере внутренней атмосферы комет // Матем. моделирование. 2002. Т. 14, № 8. С. 91–95.
4. **Коган М.Н.** Динамика разреженного газа. М.: Наука, 1967. 440 с.
5. **Лабунцов Д.А.** Анализ процессов испарения и конденсации // Теплофизика высоких температур. 1967. Т. 5, № 4. С. 647–654.
6. **Муратова Т.М., Лабунцов Д.А.** Кинетический анализ процессов испарения и конденсации // Теплофизика высоких температур. 1969. Т. 7, № 5. С. 959–967.
7. **Черчињяни К.** Математические методы в кинетической теории газов. М.: Мир, 1973. 245 с.
8. **Рао У.Р.** Temperature and density jumps in the kinetic theory of gases and vapors // Phys. Fluids. 1971. Vol. 14. P. 1340–1346.
9. **Рао У.Р.** Erratum: temperature and density jumps in the kinetic theory of gases and vapors // Phys. Fluids. 1973. Vol. 16. P. 1560.
10. **Аристов В.В., Паняшкин М.В.** Исследование релаксационных пространственных процессов с помощью решения кинетического уравнения // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 2011. Т. 51, № 1. С. 131–141.
11. **Черемисин Ф.Г.** Метод решения кинетического уравнения Больцмана для многоатомного газа // Журн. вычисл. математики и матем. физики. 2012. Т. 52, № 2. С. 270–287.
12. **Жаховский В.В., Анисимов С.И.** Численное моделирование испарения жидкости методом молекулярной динамики // Журнал эксперим. и теорет. физики. 1997. Т. 111, № 4. С. 1328–1346.
13. **Анисимов С.И.** Об испарении металла, поглощающего лазерное излучение // Журнал эксперим. и теорет. физики. 1968. Т. 54, № 1. С. 339–342.
14. **Labuntsov D.A., Kryukov A.P.** Analysis of intensive evaporation and condensation // Intern. J. Heat and Mass Transfer. 1979. Vol. 2, No. 7. P. 989–1002.
15. **Ytrehus T.** Theory and experiments on gas kinetics in evaporation / Ed. J.L. Potter // Rarefied gas dynamics. N.Y., 1977. Vol. 51, part 2. P. 1197–1212.
16. **Aoki K., Sone Y., Yamada T.** Numerical analysis of gas flows condensing on its plane condensed phase on the basis of kinetic theory // Phys. Fluids A. 1990. Vol. 2. P. 1867–1878.
17. **Gusarov A.V., Smurov I.** Gas-dynamic boundary conditions of evaporation and condensation : numerical analysis of the Knudsen layer // Phys. Fluids. 2002. Vol. 14. P. 4242–4255.
18. **Frezzotti A., Ytrehus T.** Kinetic theory study of steady condensation of a polyatomic gas // Phys. Fluids. 2006. Vol. 18, No. 2. P. 027101–027101-12.
19. **Gusarov A.V., Smurov I.** Target-vapour interaction and atomic collisions in pulsed laser ablation. // J. of Physics D: Applied Physics. 2001. Vol. 34, No. 8. P. 1147–1156.
20. **Кузнецова И.А., Юшканов А.А., Яламов Ю.И.** Сверхзвуковая конденсация одноатомного газа // Теплофизика высоких температур. 1997. Т. 35, № 2. С. 342–346.
21. **Кузнецова И.А., Юшканов А.А., Яламов Ю.И.** Сильная конденсация молекулярного газа // Изв. РАН. МЖГ. 1997. № 6. С. 168–174.
22. **Vinerean M.C., Windfäll A., Bobylev A.V.** Construction of normal discrete velocity models of the Boltzmann equation // Nuovo Cimento C. 2010. Vol. 33, No. 1. P. 257–264.

*Статья поступила в редакцию 19 января 2014 г.,
после переработки — 17 июня 2014 г.*