

ИЗМЕНЕНИЕ ЭНТРОПИИ НА ФРОНТЕ ИСПАРЕНИЯ.

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

Институт математического моделирования РАН
Институт общей физики РАН

Проводится сравнительный анализ изменения энтропии в различных моделях газодинамического разрыва, отделяющего конденсированную фазу от равновесного потока пара. Полученные результаты показывают существенную зависимость поведения энтропии от выбора модели и качественно согласуются с выводами, основанными на иных предположениях.

ENTROPY VARIATION ON EVAPORATION FRONT.

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

The comparative analysis of the entropy variation is performed for the different models of gas-dynamics discontinuity, separating condense phase from equilibrium gas flow. The obtained results demonstrate the essential dependence of entropy behavior on choice of the model and qualitatively correlate with conclusions, based on other assumptions.

При описании динамики неравновесных фазовых превращений первого рода в рамках теории сплошных сред возникает вопрос о граничных условиях на фронте перехода, устанавливающих связь между параметрами контактирующих фаз и мерой неравновесности (или интенсивности) фазового превращения. В случае испарения такой мерой может служить число Маха M в потоке пара на внешней стороне газодинамического разрыва (кнудсеновского слоя), отделяющего поверхность конденсированной среды от области установившегося газодинамического течения.

Подобная связь отличается от соответствующего соотношения на ударной волне (адиабате Гюгонно) тем, в частности, что состояние пара перед скачком на внутренней стороне кнудсеновского слоя является неравновесным и не может характеризоваться таким термодинамическим параметром, как температура. Поэтому в отличие от ударной волны здесь уже нельзя при получении подобной связи ограничиваться законами сохранения потоков массы g_1 , импульса g_2 и энергии g_3 и необходимо в явном виде учитывать исходную неравновесность потока испаренного вещества.

Обычно этот учет проводится на основе различных предположений о виде неравновесной функции распределения f на внутренней стороне кнудсеновского слоя, поскольку более строгое решение данной задачи является весьма трудоемким и до сих пор еще не получено с необходимой полнотой. При таком модельном подходе вопрос адекватности выбора конкретной формы f остается, как правило, открытым.

В работе [1] было проанализировано несколько известных ранее [2,3] и новых [1] моделей с точки зрения общего характера поведения получаемых таким образом зависимостей плотности $n(M)$ и температуры $T(M)$ во всем диапазоне изменения параметра M . Оказалось, что модели [1,2], имеющие экстремумы потоков g_i при $M = 1$, дают близкие между собой результаты, которые в то же время заметно отличаются от данных модели [3], в которой положения экстремумов у потоков не совпадают с $M = 1$.

При сравнительном анализе адекватности выбора неравновесной функции распределения f могут быть использованы также и другие критерии. В настоящей работе с этой целью рассматривается изменение энтропии в потоке пара на фронте испарительного скачка, которое получается в моделях с различным выбором f .

В соответствии с принципом, сформулированным И.Пригожиным [4] при определенных условиях стационарное неравновесное состояние может характеризоваться минимумом производства энтропии. Подобный принцип можно в некотором смысле рассматривать как обобщение на случай неравновесных процессов известного положения о максимальности энтропии для равновесных состояний, в которых ее производство обращается в нуль.

Следует иметь в виду при этом, что такое обобщение по ряду причин не столь универсально, как его равновесный аналог, в частности, из-за необходимости определения для неравновесных процессов самого понятия энтропии и связанных с нею величин. Однако в рассматриваемом случае идеального газа и одночастичных функций распределения для энтропии, по-видимому, можно использовать обычное больцмановское определение (см., например, [5]):

$$S = -k \int \int \int \vec{v} \ln [f(\vec{v})] d\vec{v} \quad (1)$$

где k - постоянная Больцмана.

В случае максвелловской функции распределения $f = f_0(\vec{v}; n, T, u)$ из (1) получается следующее выражение для энтропии идеального газа

$$S = kn(S_0 + s_e) \quad (2)$$

где

$$n = \int \int \int f(\vec{v}) d\vec{v} \quad (3)$$

$$S_0 = \frac{3}{2} + \ln \left[\left(\frac{2\pi kT_s}{m} \right)^{3/2} \frac{1}{n_s} \right] \quad (4)$$

$$s_e = \ln \left[\left(\frac{T}{T_s} \right)^{3/2} \left(\frac{n}{n_s} \right)^{-1} \right] \quad (5)$$

и

$$f = f_0(\vec{v}; n, T, u) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m}{2kT} (v_x^2 + v_y^2 + (v_z - u)^2) \right] \quad (6)$$

В этих выражениях в явном виде введена нормировка на температуру T_s и концентрацию n_s насыщенного пара и выделена постоянная часть энтропии S_0 , которая не зависит от изменяющихся газовых параметров n и T при фиксированных значениях n_s и T_s .

В отсутствие испарения, когда $n = n_s$ и $T = T_s$, величина s_e обращается в нуль. При числе Маха $M \neq 0$ на внешней стороне кнудсеновского слоя $s_e \neq 0$, причем значение s_e будет различным для различных моделей, и это различие может быть использовано для сравнительного анализа моделей испарительного скачка.

На внутренней стороне кнудсеновского слоя состояние газа при $M > 0$ является существенно неравновесным, и в этом случае вместо формулы (5) для отличия энтропии, приходящейся на одну частицу, от энтропии частиц S_0 в равновесном случае необходимо использовать более общее исходное выражение (1,2):

$$s = \frac{S}{kn} - S_0 \quad (7)$$

где функция распределения f , определяющая плотность энтропии s , уже не обязательно является равновесной и имеет различный вид в разных моделях. Заметим, что s может обращаться в нуль не только в равновесии, когда $f = f_0$, но и в других случаях, например, для "полумакселловской" функции $f = \Theta(\pm v_z) f_0(\vec{v}; n_s, T_s, 0)$, где $\Theta(v)$ - единичная функция Хэвисайда.

В модели [3] функция распределения f задается в виде отдельных выражений f^+ и f^- для положительной (направленной от поверхности) и отрицательной величины нормальной компоненты скорости

$$f^+ = \Theta(v_z) f_0(\vec{v}; n_s, T_s, 0) = f_0^+ = \\ = n_s \left(\frac{m}{2\pi k T_s} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k T_s} \right], \quad v_z > 0 \quad (8)$$

$$f_{(1)}^- = \Theta(-v_z) \beta f_0(\vec{v}; n, T, u) = \\ = \beta n \left(\frac{m}{2\pi k T} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{m}{2k T} (v_x^2 + v_y^2 + (v_z - u)^2) \right], \quad v_z < 0 \quad (9)$$

где функция $f_0(\vec{v}; n, T, u)$ описывает равновесный поток пара со средней скоростью $u = M(\gamma k T/m)^{1/2}$ на внешней стороне кнудсеновского слоя, а взаимосвязь параметров n , T , u (или M) и β определяется из условий сохранения потоков массы, импульса и энергии на этом слое.

Поскольку такая модель не обеспечивает экстремальности потоков при $M = 1$, то в предложенном нами в [1] варианте вместо (9) для обратного потока частиц используется выражение

$$f_{(2)}^- = \beta f_0(\vec{v}; n, T, u) + (1 - \beta) f_0(\vec{v}; n_1, T_1, u_1) \quad v_z < 0 \quad (10)$$

где

$$T_1^{1/2} = \varepsilon T_s^{1/2} + (1 - \varepsilon) T^{1/2} \\ n_1 T_1^{1/2} = \varepsilon n_s T_s^{1/2} + (1 - \varepsilon) n T^{1/2} \\ u_1 = M_1 (\gamma k T_1/m)^{1/2}, \quad M_1 = \delta M;$$

здесь β , как и раньше, играет роль переменного коэффициента, характеризующего величину обратного потока, а ε и δ – подгоночные параметры, значения которых выбираются из условия локализации экстремумов потоков g ; при $M = 1$.

В другой предложенной в [1] модели f^- имеет вид "полумаксвелловского" распределения

$$f_{(3)}^- = \alpha^7 f_0(\vec{v}; n_s, \alpha^2 T_s, 0), \quad v_z < 0 \quad (11)$$

в которой коэффициент α имеет смысл, аналогичный β в (9,10). Особенностью такого выбора f^- является отсутствие явной ее зависимости от газодинамических параметров n , T , u , что и позволяет локализовать экстремумы

всех трех потоков g_i в точке $M = 1$ без дополнительной подгонки параметров в связи с тем, что коэффициент α в этом случае удовлетворяет условию $d\alpha/dM = 0$ при $M = 1$.

В модели [2] неравновесное распределение на внутренней стороне кнудсеновского слоя задается единым аналитическим выражением

$$f_{(4)} = f_0(\vec{v}; n_1, T_l, T_r, u_1) = n \left[\left(\frac{m}{2\pi k} \right)^3 \frac{1}{T_l T_r^2} \right]^{1/2} \exp \left[-m \left(\frac{(v_z - u_1)^2}{2kT_l} + \frac{v_x^2 + v_y^2}{2kT_r} \right) \right] \quad (12)$$

Для связи параметров n_1, T_l, T_r, u_1 анизотропной максвелловской функции распределения $f_{(4)}$ с параметрами испаряющейся поверхности n_s, T_s в [2] используется равенство трех потоков $g_i^+ = g_{0i}^+$, вычисленных соответственно с помощью f^+ и f_0^+ в области $v_z > 0$. Связь этих параметров с газодинамическими величинами n, T, u получается из условия постоянства потоков g_i , экстремумы которых совпадают с $M = 1$, так как f не содержит явной зависимости от n, T, u .

Используя соотношения (1), (3), (4), (7) и выполняя формальное интегрирование с модельными функциями распределения (8)-(12), получаем следующие выражения для энтропии на внутренней стороне кнудсеновского слоя для каждой из рассматриваемых моделей:

$$s_{(1)} = \beta n \frac{\operatorname{erfc}(\varphi) \ln \left(\frac{T_s^3 n_s}{T_s^3 n} \right) + \varphi \pi^{-1/2} \exp(-\varphi^2)}{n_s + \beta n \cdot \operatorname{erfc}(\varphi)} \quad (13)$$

$$s_{(2)} = \frac{\frac{3}{2} n_s - \int_{-\infty}^0 \left(\int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_{(2)}^- \ln(f_{(2)}^-) dv_x dv_y \right) dv_z}{n_s + \beta n \cdot \operatorname{erfc}(\varphi) + (1 - \beta) n_1 \cdot \operatorname{erfc}(\varphi_1)} - \frac{3}{2} \quad (14)$$

$$s_{(3)} = \frac{1}{2} + \frac{\alpha^8 \ln(\alpha^8)}{2(1 - \alpha^8)} \quad (15)$$

$$s_{(4)} = \ln \left(\frac{T_l T_r^2 n_s}{T_s^3 n_1} \right) \quad (16)$$

где $\operatorname{erfc}(\varphi) = (2/\sqrt{\pi}) \int_{\varphi}^{\infty} \exp(-x^2) dx$ - дополнительный интеграл ошибок, $\varphi = (\gamma/2)^{1/2} M$, индекс в скобках здесь и в дальнейшем означает номер модели.

Поведение энтропии на внешней $s_{(i)}^e$ и внутренней $s_{(i)}$ сторонах кнудсеновского слоя в зависимости от числа Маха M показано на рис.1-4 для моделей

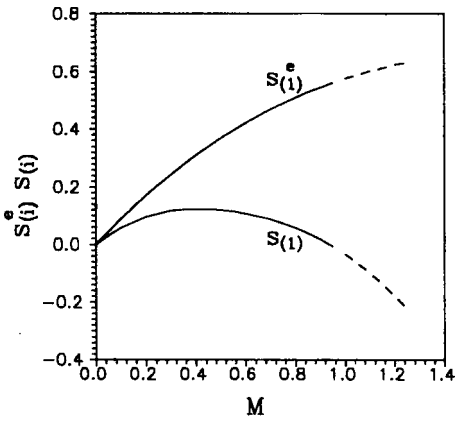


Рис.1 Зависимость энтропии на внешней s_i^e и внутренней s_i сторонах кнудсеновского слоя от числа Маха в модели [3].

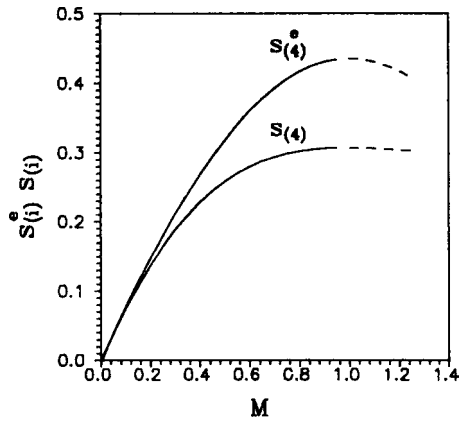


Рис.2 Энтропия в модели [2] на внешней s_4^e и внутренней s_4 сторонах кнудсеновского слоя от числа Маха.

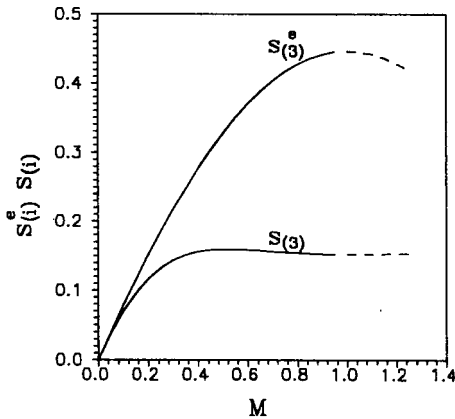


Рис.3

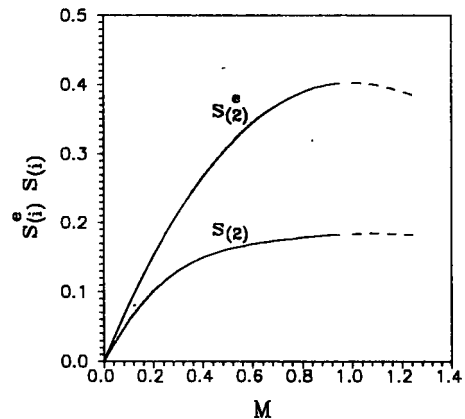


Рис.4

Изменение равновесной s_i^e и неравновесной s_i энтропии в зависимости от числа Маха в моделях [1].

(9)-(12) соответственно. Из сопоставления этих зависимостей (рис.5) видно, что изменение энтропии на испарительном скачке $\Delta s_{(i)} = s_{(i)}^e - s_{(i)}$ имеет наименьшее значение в модели (12), а наибольшее - в модели (9). При $M = 1$ эти изменения составляют: $\Delta s_{(1)} = 0.6093$, $\Delta s_{(2)} = 0.2189$, $\Delta s_{(3)} = 0.2946$, $\Delta s_{(4)} = 0.1287$. причем в модели [3] энтропия $s_{(1)}$ на внутренней стороне кнудсеновского слоя оказывается отрицательной, то есть меньше энтропии насыщенного пара в состоянии равновесия. Такое отклонение обусловлено неудачным выбором неравновесной функции распределения (9) для обратного потока.

Кроме того, в этой модели при числах Маха $M \leq 1.19$ поток энтропии на внешней стороне кнудсеновского слоя оказывается меньше, чем на внутренней. Это обстоятельство, как противоречащее H -теореме Больцмана, было отмечено также в работе [6].

Таким образом, если исходить из принципа минимальности изменения энтропии, то полученные в настоящей работе результаты показывают, что среди рассмотренных моделей следует отдавать предпочтение тем, которые обеспечивают условие экстремальности потоков массы, импульса и энергии при $M = 1$. Этот вывод согласуется с данными работы [1] и с численными

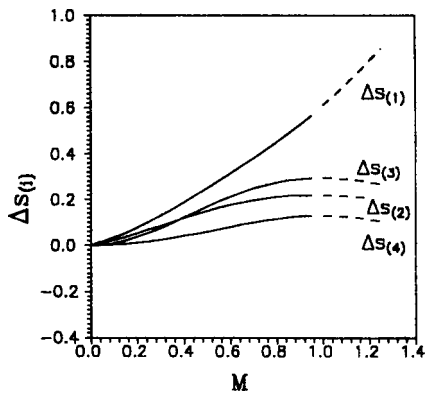


Рис.5 Изменение энтропии $\Delta s_{(i)} = s_{(i)}^e - s_{(i)}$ при переходе через кнудсеновский слой для моделей [3]- $\Delta s_{(1)}$, [1]- $\Delta s_{(2)}$, $\Delta s_{(3)}$, [2]- $\Delta s_{(4)}$

расчетами для испарительного скачка по методу Монте-Карло, приведенными в работе [7]. Подчеркнем, что модель испарительного скачка, изложенная в монографии [8] и среди других упоминаемая в [7], существенно отличается от модели [3].

В заключение необходимо сделать еще несколько дополнительных замечаний. Скорость производства энтропии на испарительном скачке зависит не только от изменения энтропии в расчете на одну частицу $\Delta s_{(i)}$, но и от величины потока частиц g_1 , которая не одинакова в разных моделях. Однако эта разница в g_1 для разных моделей относительно невелика по сравнению с различием в изменении эн-

тропии $\Delta s_{(i)}$, которое в данном случае является определяющим фактором. При этом необходимо иметь в виду, как уже отмечалось выше, что в случае сильнонеравновесных процессов остаются открытыми вопросы об определе-

нии и границах применимости основных принципов и понятий, включая энтропию и скорость ее производства. Подробное рассмотрение этой проблемы, обсуждаемой, например, в [9], выходит за рамки данной работы.

Список литературы

1. В.И.Мажукин, П.А.Прудковский, А.А.Самохин. О газодинамических граничных условиях на фронте испарения. // Математическое Моделирование, 1993, т.5, N.6, с.3-10.
2. D.Crout. An application of kinetic theory to the problems of evaporation and sublimation of monoatomic gases.//J. Math.Physics, 1936, V.15, pp.1-54.
3. С.И.Анисимов. Об испарении металла, поглощающего лазерное излучение.// ЖЭТФ, 1968, т.54, N.1, с.339-342.
Ю.З.Бубнов, М.Н.Либенсон. Анализ процесса движения дозвукового потока пара в квазизамкнутом объеме.// ИФЖ, 1973, т.25, N. 3, с.460-466.
C.J.Knight. Theoretical Modeling of Rapid Surface Vaporization with Back Pressure.// AIAA J., 1979, V.17, N.5, pp.81-86.
4. И.Пригожин. От существующего к возникающему.- М.: Наука, 1985.
5. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика. Ч.1-М.: Наука, 1976.
6. T.Ytrehus. Some Gas Dynamics Aspects of a one-dimensional Effusive Flow System. //Publ. N°73:5, Institutt for Mekanikk, Norges Tekniske Hogskole, Universitetet i Trondheim, Trondheim, Norway, 1973, pp.1-32
7. D.Sibold, H.M.Urbassek. Monte Carlo study of Knudsen layers in evaporation from elemental and binary media.//Phys. Fluids A,1993, v.5, N.1, pp.243-256.
8. С.И.Анисимов, Я.А.Имас, Г.С.Романов, Ю.В.Ходыко. Действие излучения большой мощности на металлы. - М.: Наука, 1970.
9. А.М.Семенов. Описывает ли уравнение локального баланса энтропии необратимые процессы. // ТВТ, 1993, т. 31, N.6, с.909-914.