

УДК 532.529.5:533.77

© 1992 г. Н. А. КУДРЯШОВ, Ан. А. ТУТНОВ

## МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕСТАЦИОНАРНОЙ КОНДЕНСАЦИИ ПРИ БЫСТРОМ РАСШИРЕНИИ ИСПАРЕННОГО ВЕЩЕСТВА

Изучению процессов конденсации пара при адиабатичном расширении посвящен ряд работ (см., например, [1, 2]). Однако для описания конденсации в этих работах использовано равновесное приближение. Такая модель справедлива, когда характерное время расширения пара много больше времени кинетики конденсации пара. Однако в ряде процессов, например при воздействии лазерного излучения на мишень с характерным размером, меньшим 1 см [3], быстрое расширение пара приводит к тому, что размеры капель на стадии закалки сравнимы с критическим радиусом зародышей. Это обстоятельство приводит к необходимости учета изменения радиуса капель вследствие флуктуаций. Аналогичная ситуация возникает в ряде других технологических процессов. Количественный анализ неравновесности процесса конденсации при расширении облака пара рассмотрен в данной работе.

Изучен процесс конденсации пара при сферически-симметричном взрыве с использованием кинетической модели нестационарной нуклеации. Для описания движения двухфазной системы, состоящей из пара и капель жидкости, используется однетемпературная односкоростная модель. Получены функции распределения капель образовавшейся жидкости по размерам и газодинамические характеристики пара в различные моменты времени. Обсуждаются результаты сравнения квазистационарной и нестационарной моделей кинетики конденсации пара.

**1. Модель двухфазной среды.** Рассмотрим область пара радиуса  $r_0$  с повышенным давлением  $p_1$  и плотностью  $\rho_{11}^0$ , в начальный момент времени находящуюся в бесконечном объеме газа с давлением  $p_0$  и плотностью  $\rho_{10}^0$ . При  $p_1 > p_0$  в приближении лопающейся оболочки сферический объем пара при  $t > 0$  расширяется и охлаждается. После достижения в какой-либо точке облака состояния насыщения пар начинает конденсироваться. Предполагаем, что в каждой координате облака пар и образовавшиеся капли жидкости находятся в механическом и термодинамическом равновесии, и считаем жидкость несжимаемой. Будем обозначать буквами с индексом 1 характеристики несущей фазы, с индексом 2 — характеристики дисперсной (жидкой) фазы.

Пусть  $\alpha(r, t)$  — объемная доля жидкой фазы в момент времени  $t$  в элементарном объеме, расположенном на расстоянии  $r$  от центра облака. При  $r > R(t)$  объемная доля  $\alpha = 0$ . Здесь  $R(t)$  — координата контактной границы облака пара с окружающей средой.

В соответствии с предположением о несжимаемости жидкой фазы математическая постановка задачи в односкоростном однетемпературном приближении имеет вид [4]

$$\frac{\partial \rho_1}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \rho_1 u = -J, \quad \rho_1 = (1 - \alpha) \rho_1^0, \quad \rho_2 = \alpha \rho_2^0 \quad (1.1)$$

$$\dot{r} = \rho_2^0 \left( \frac{\partial \alpha}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \alpha u \right), \quad \rho_2^0 = \text{const} \quad (1.2)$$

$$\rho \left( \frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial r} \right) + \frac{\partial p}{\partial r} = 0, \quad \rho = \rho_1 + \rho_2 \quad (1.3)$$

$$\frac{\partial E}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2(E + p)u) = 0 \quad (1.4)$$

$$\frac{dR(t)}{dt} = u(R(t), t) \quad (1.5)$$

$$E = \rho_1(e_1 + 1/2u^2) + \rho_2(e_2 + 1/2u^2)$$

$$e_1 = c_1 T, \quad e_2 = c_2 T - e_0, \quad p = R\rho_1 T$$

Здесь  $\rho_1^\circ$  — плотность несущей фазы,  $u$  — скорость движения среды,  $p$  — давление несущей фазы,  $R$  — удельная газовая постоянная,  $c_1, c_2$  — удельные теплоемкости несущей и жидкой фазы. Величина  $e_0$  находится приравнением скрытой теплоты конденсации и разности энергий  $e_1$  и  $e_2$  при температуре насыщения.

Граничные и начальные условия для (1.1)—(1.4) имеют вид:

$$r = 0: u = \frac{\partial \rho_1^\circ}{\partial r} = \frac{\partial T}{\partial r} = 0$$

$$t=0: \rho_1^\circ = \rho_{11}^\circ, r \leq r_0; \quad \rho_1^\circ = \rho_{10}^\circ, r > r_0$$

$$T = T_1 = \frac{p_1}{R\rho_{11}^\circ}, \quad r \leq r_0;$$

$$T = T_0 = \frac{p_0}{R\rho_{10}^\circ}, \quad r > r_0$$

$$u = 0, \quad \alpha = 0$$

Для полного замыкания системы уравнений требуется учесть кинетику конденсации пара в облаке, что даст возможность вычислять  $\alpha(r, t)$  на каждом временном слое по газодинамическим характеристикам пара.

2. Модель кинетики конденсации пара. Для описания конденсации пара в разлетающемся облаке введем функцию распределения капель в зависимости от их размеров  $f(a, r, t)$ . Эта функция в диффузионном приближении удовлетворяет уравнению Фоккера—Планка [5]

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 f u + \frac{\partial f A}{\partial a} = \frac{\partial}{\partial a} \left( B \frac{\partial f}{\partial a} \right) \quad (2.1)$$

где  $t > t_*$ ,  $a > a_*$  ( $t_*$  — время достижения паром кривой насыщения в точке с координатой  $r$ ,  $a_*$  — критический радиус зародышей).

При  $a < a_*$  зародыши неустойчивые и с течением времени рассасываются. При  $a > a_*$  образовавшийся зародыш становится центром конденсации. Если число молекул в капле обозначить  $N$ , то, согласно теории нуклеации, дифференциальное уравнение для  $N$  можно записать в виде [6]

$$\frac{dN}{dt} = n \langle v \rangle S \left\{ 1 - \exp \left[ - \frac{q\theta}{T} \left( 1 - \frac{a_*}{a} \right) \right] \right\} \quad (2.2)$$

$$\langle v \rangle = \sqrt{\frac{8T}{\pi m}}$$

Здесь  $\langle v \rangle$  — средняя тепловая скорость атомов пара:  $m$  — масса атома железа,  $n$  — концентрация пара в облаке,  $S$  — площадь сферической поверхности капли,  $q$  — теплота конденсации, приходящаяся на одну молекулу. Выражая  $N$  и  $S$  через радиус капли:  $N = 4\pi a^3/3\Omega$ ,  $S = 4\pi a^2$  ( $\Omega$  — объем одной молекулы в жидкой фазе), из (2.2) получаем выражение для макроскопической скорости роста радиуса капли

$$A = \frac{da}{dt} = n(v)\Omega \left\{ 1 - \exp \left[ -\frac{q\theta}{T} \left( 1 - \frac{a_c}{a} \right) \right] \right\} \quad (2.3)$$

В случае, когда газодинамическое время много больше кинетического времени конденсации, капли вырастают до размеров, значительно превышающих критический радиус  $a_c$ . В (2.3) при этом можно пренебречь значением  $a_c/a$  по сравнению с единицей и определить скорость роста радиуса капель только через термодинамические характеристики пара. Кроме того, в этом случае можно пренебречь диффузионным членом в (2.1), что приведет к модели квазистационарной нуклеации [1].

Диффузионный член в уравнении (2.1) отвечает флуктуационным изменениям радиуса капли. Коэффициенты  $A$  и  $B$  в (2.1) связаны соотношением, которое следует из условия обращения в нуль плотности потока капель в пространстве размеров для равновесного распределения [5]

$$A = -\frac{B}{T} \frac{dF(a)}{da}, \quad F(a) = 4\pi a^2 \sigma - \frac{8\pi a^3 \sigma}{3a_c} \quad (2.4)$$

Здесь  $F(a)$  — свободная энергия Гиббса капли,  $\sigma$  — поверхностное натяжение жидкой фазы.

Уравнение (2.1) дополняется граничными и начальными условиями в виде [7]

$$f(a, r, t) \approx \frac{1}{2} f_0(a, r, t) \approx \frac{a^2 n}{\Omega} \exp \left( -\frac{4\pi a^2 \sigma}{3T} \right) \\ f(a \rightarrow \infty) = 0, \quad \frac{\partial f(r=0)}{\partial r} = 0, \quad f(a, r, t) = 0 \quad (2.5)$$

Здесь  $f_0(a, r, t)$  — значение равновесной функции распределения кластеров с критическим радиусом:  $a_c = 2\sigma\Omega/q$ . Объемная доля жидкой фазы находится интегрированием функции распределения

$$\alpha(r, t) = \frac{4\pi}{3} \int_{a_c}^{\infty} a^3 f(a, r, t) da$$

Из самосогласованного решения системы уравнений динамики двухфазной среды (1.1)—(1.4) и кинетического уравнения (2.1) находятся функции распределения капель по размерам и газодинамические характеристики пара и газа в каждый момент времени.

Для численного решения газодинамической задачи о расширении облака пара в данной работе использована идея метода коррекции потоков [8]. Применение этого метода вызвано наличием скачков у решений нелинейных уравнений (1.1)—(1.4). Система уравнений после введения безразмерных переменных

$$r' = \frac{r}{r_0}, \quad t' = t \frac{c_0}{r_0}, \quad T' = \frac{T}{T_0}, \quad \rho_0' = \frac{\rho_1}{\rho_{10}}, \quad u' = \frac{u}{c_0}$$

где  $c_0$  — скорость звука, расщепляясь на два полушага по времени в зависимости от действия физических факторов. На первом полушаге учитывался массообмен фаз, т. е. вместо (1.1) решалось уравнение

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \rho_1}{\partial t} = -J, \quad \pi r < t \leq \pi r + \frac{\tau}{2}$$

где  $\tau$  — шаг по времени. В уравнениях (1.3), (1.4) учитывалось влияние градиента давления и выделение тепла из-за увеличения объемной доли  $\alpha$ . На втором полушаге по времени методом коррекции потоков [8] решалась система уравнений, учитывающая потоки массы, импульса и энергии

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho u}{\partial r} = 0, \quad \pi r + \frac{\tau}{2} < t \leq (\pi + 1)r \quad (2.6)$$

$$\eta = (r^2 \rho, r^2 \rho u, r^2 \rho u^2)$$

Здесь использовано то обстоятельство, что, записывая уравнение непрерывности для обеих фаз в виде

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \rho u = 0, \quad \rho = (1 - \alpha) \rho_1^0 + \alpha \rho_2^0$$

уравнение (1.3) можно привести к дивергентному виду (2.6). Полученные значения плотности и температуры пара на первом шаге по времени дают возможность сделать шаг в решении кинетического уравнения (2.1). После расчета (в каждой координате  $r$ ) функции  $f(a, r, t)$  находим для каждой координаты объемную долю жидкой фазы  $\alpha$ . Полученные значения  $\alpha(r, t)$  позволяют сделать следующий шаг по времени для решения уравнений двухфазной среды и т. д.

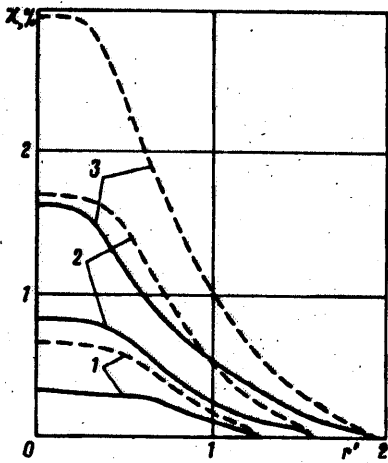
При решении уравнения (2.1) следует учитывать, что левая граница  $a = a_0$  подвижная.

**3. Обсуждение результатов.** Процесс конденсации пара при его расширении определяется прежде всего газодинамикой взрыва. При моделировании одномерного расширения облака пара исходные данные для расчета выбирались следующими: начальный радиус облака  $r_0 = 10^{-3}$  м, плотность пара в облаке  $\rho_{11}^0 = 1,8 \cdot 10^{-2}$  кг/м<sup>3</sup>, плотность окружающего газа  $\rho_{10}^0 = 1,8 \cdot 10^{-3}$  кг/м<sup>3</sup>, температура пара  $T_1 = 2000$  К, температура газа  $T_0 = 250$  К. При указанных условиях температура пара незначительно превосходит температуру насыщения:  $T_1 \approx T_s(\rho_{11}^0)$ . Выбор значительного перепада плотности является необходимым условием для наступления закалки. Вследствие расширения облака плотность пара уменьшается до значений порядка  $\rho_{10}^0$ . Несмотря на наличие остаточной конденсации при значениях плотности  $\rho_{11}^0 \approx \rho_{10}^0$  дальнейшим ростом капель при  $\rho_{11}^0 / \rho_{10}^0 \gg 1$  можно пренебречь вследствие перемешивания пара с окружающим газом. Малость скорости конденсации на этой стадии позволяет не учитывать механизм перемешивания.

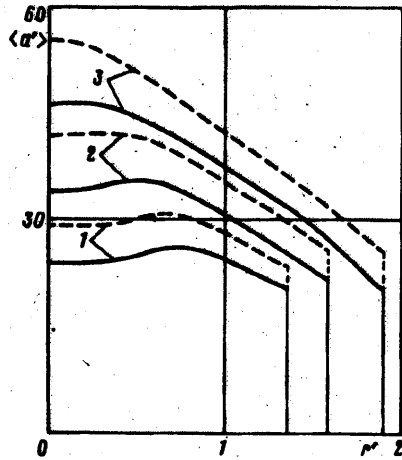
В результате решения задачи установлено, что конденсация пара при  $r_0 = 10^{-3}$  м за малый промежуток времени охватывает весь объем шара. При этом температура в облаке близка к равновесной. На фиг. 1 изображены распределения степени конденсации пара железа  $\chi(r')$  (где  $\chi = (\alpha/n\Omega) \cdot 100\%$ ,  $r' = r/r_0$ ) в следующие моменты времени:  $t = 2,2 \cdot 10^{-6}$ ,  $2,6 \cdot 10^{-6}$ ,  $3 \cdot 10^{-6}$  с (кривые 1—3). Штриховой линией указаны результаты расчета  $\chi$  для тех же начальных данных при использовании квазистационарной модели конденсации, т. е. без учета флуктуаций и в предположении, что скорость роста радиуса капли зависит лишь от плотности и температуры пара. Завышения значений  $\chi$  при использовании квазистационарной модели приводят к 100%-ной ошибке. В то же время при начальном радиусе облака  $r_0 = 0,1$  м ошибка не превышает 1%.

На фиг. 2 изображена функция распределения капель по размерам  $f(a')$  ( $a' = a/a_0$ ) в координате  $r = r_0$  в моменты времени  $t = 5,4 \cdot 10^{-4}$ ,  $6,7 \cdot 10^{-2}$ ,  $8,0 \cdot 10^{-1}$  с (кривые 1—3). Здесь  $a_0 = (3\Omega/4\pi)^{1/3}$  — радиус атомарной ячейки жидкого железа. Момент достижения функцией распределения своего максимального значения в точке  $a = a_0$  соответствует максимальному пересыщению пара. Далее значение  $f(a_0/a_0)$  быстро убывает до малой величины, что соответствует приближению состояния пара к равновесному. В дальнейшем капли растут и профиль функции распределения смещается в сторону больших размеров. Благодаря флуктуациям имеет место размытие профиля, а из-за расширения пара — уменьшение значений  $f(a')$ . Следует заметить, что в координатах облака с наименьшей скоростью расширения пара дисперсия размеров капель максимальна.

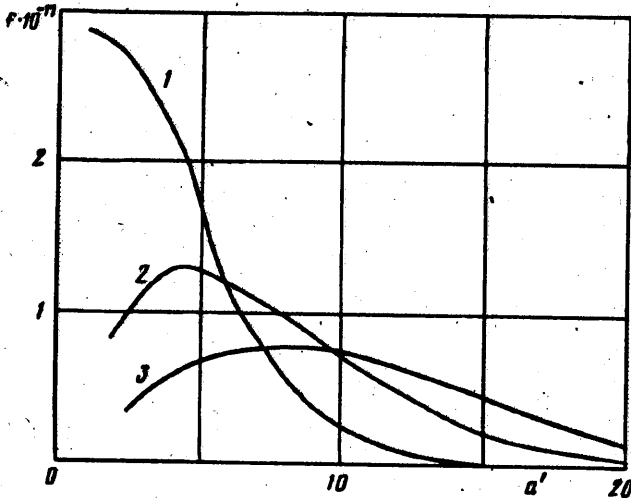
При движении вдоль состояния насыщения объемная доля капель за равные промежутки времени увеличивается приблизительно на равные величины. Однако вследствие увеличения поверхности капель скорость роста их радиуса уменьшается. По этой причине значение среднего радиуса капель в рассматриваемой координате зависит от характера расширения на начальной стадии конденсации пара.



Фиг. 1



Фиг. 3



Фиг. 2

На фиг. 3 изображены распределения средних радиусов капель  $\langle a' \rangle = \langle a \rangle / a_0$  в те же моменты времени, что и  $\chi(r')$ . Размеры капель определяются прежде всего числом образовавшихся центров конденсации. После прохождения паром состояния насыщения процесс конденсации пара связан с образованием капель и с их ростом. Причем число образовавшихся капель определяется максимальным пересыщением, которое зависит от скорости расширения пара. При медленном расширении, за время увеличения  $\alpha$  от нуля до значений, при которых выделение тепла компенсирует рост пересыщения, капли подрастают. При более быстром расширении скорость образования новых капель преобладает над скоростью роста уже имеющихся центров конденсации, т. е. степень пересыщения достигает больших значений. В частности, в области контактной границы, где расширение идет наиболее интенсивно, образуется максимальное число капель, в то время как во внутренних слоях облака конденсация идет на меньшем числе центров конденсации, что приводит к увеличению скорости роста радиусов капель. Вследствие этого значение среднего радиуса капель увеличивается от контактной границы к центру облака.

Поскольку охлаждение в области контактной границы происходит наиболее интенсивно, процесс закалки начинается именно в этой области. В связи с этим значение степени конденсации увеличивается в направлении центра облака.

Проведенные расчеты показали, что при расширении облака в пустоту качественная картина процесса конденсации остается такой же, что и при расширении в атмосфере. Аналогичные характеристики возникают и при осесимметричном расширении пара.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966. 686 с.
2. Райзер Ю. П. О конденсации в облаке испаренного вещества расширяющегося в пустоту//ЖЭТФ. 1959. Т. 37. № 6. С. 1741—1750.
3. Дюдерштадт Дж.-Дж., Мозес Г. А. Инерциальный термоядерный синтез. М.: Энергоатомиздат, 1984. 301 с.
4. Нигматулин Р. И. Динамика многофазных сред. М.: Наука, 1987. Ч. 1. 464 с.; Ч. 2. 359 с.
5. Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Физическая кинетика. М.: Наука, 1979. 527 с.
6. Шнейдман В. А., Шубенко А. Л. Формирование и эволюция спектра размеров частиц жидкой фазы при неравновесной гомогенной конденсации//Изв. АН СССР. МЖГ. 1990. № 1. С. 108—116.
7. Kelton K. F., Greer A. L., Thompson C. V. Transient nucleation in condensed systems//J. Chem. Phys. 1983. V. 79. № 12. P. 6261—6276.
8. Управляемый термоядерный синтез/Под ред. Дж. Киллина. М.: Мир, 1980. С. 92—141.
9. Кудряшов Н. А., Тутнов А. А. Математическое моделирование конденсации примеси пара при сферически-симметричном расширении газового облака//Математическое моделирование. 1996. Т. 2. № 8. С. 42—50.

Москва

Поступила в редакцию  
23.XI.1990