УДК 517.9

Условия на термокапиллярной поверхности, учитывающие испарение жидкости и зависимость коэффициентов переноса от температуры*

О.Н. Гончарова

Алтайский государственный университет (Барнаул, Россия)

Conditions on Thermocapillary Surface with Consideration of Liquid Evaporation and Transfer Coefficient Temperature Dependence

O.N. Goncharova

Altai State University (Barnaul, Russia)

Конвективные течения жидкостей под действием сопутствующего потока газа и вызываемого им испарения активно изучаются в настоящее время аналитически, численно и экспериментально. Задача математического моделирования конвективных процессов с учетом испарения является чрезвычайно сложной. Принципиальным вопросом остается формулировка граничных условий на поверхности раздела жидкости и газопаровой смеси. На основе законов сохранения и соотношений на сильном разрыве выписываются обобщенные кинематическое, динамическое и энергетическое условия на термокапиллярной границе раздела. Данные условия формулируются с учетом зависимости от температуры коэффициентов переноса. Гипотезы, принимаемые при выводе условий на поверхности раздела с испарением, включают в себя отождествление свободной поверхностной энергии с коэффициентом поверхностного натяжения, закон Стокса для несжимаемой жидкости, законы Фурье и Фика для определения потока тепла и пара, установление скрытой теплоты испарения как скачка внутренней потенциальной энергии. Предполагается непрерывность касательных скоростей и температуры на границе раздела, а поток испаряющейся жидкости определяется исходя из кинетической теории.

Ключевые слова: математическая модель, термокапиллярная граница раздела, испарение, условия на границе раздела, зависящие от температуры коэффициенты переноса.

Convective flows of fluids under action of a co-current gas flux and gas related evaporation effects are actively investigated nowadays analytically, numerically and experimentally. The problem of mathematical modeling of convective processes with evaporation is extremely complicated. Formulation of boundary conditions on the interface between liquid and gas-vapor mixture is a crucial aspect here. In this paper, generalized kinematic, dynamic and energy conditions on the thermocapillary interface are presented. The interface conditions are formulated with consideration of transfer coefficient temperature dependence under a hypothesis that free surface energy is identified with a surface tension coefficient, Stokes' law is used for incompressible fluid, heat and vapor fluxes are derived from Fourier and Fick laws, and latent heat of evaporation is a jump of inner potential energy. Continuity of temperature and tangential velocities on the interface is assumed, and evaporation mass flux is obtained from kinetic theory.

Key words: mathematical model, thermocapillary interface, evaporation, interface conditions, temperature dependent transfer coefficients.

DOI 10.14258/izvasu(2016)1-18

Моделирование течений жидкостей, имеющих поверхности раздела, вызвано интенсивным развитием наукоемких технологий, а также новыми экспериментами по исследованию особенностей конвективных течений под действием сопутствующих потоков газа. Математические модели для изучения течений жидкостей включают в себя граничные условия на поверхности раздела.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 14-08-00163).

Если предполагается, что данная поверхность является термокапиллярной границей, но допускается перенос массы через нее в результате, например, испарения, то требуется провести обобщение кинематического, динамического и энергетического условий, сформулированных для случая свободной поверхности. Проблема постановки граничных условий в случае, когда следует изучить перенос примеси в расплаве, успешно решена для задач плавления и кристаллизации (см. [1]). В работах [2–4] проведено математическое моделирование процессов формирования сферических микробаллонов с учетом диффузионного переноса растворенного газа как пассивной примеси через свободную границу. В [2] осуществлена постановка задачи на основе уравнений Навье-Стокса, теплопереноса и диффузии пассивной примеси, сформулированы условия на свободных поверхностях, определяющие, в том числе, баланс энергии на внутренней границе и диффузионный поток массы через нее. Из недавних работ, посвященных выводу и анализу условий на границе раздела с испарением, следует отметить [5–7]. Исследования автора [8–10] посвящены выводу и параметрическому анализу условий на границе раздела в случае постоянных коэффициентов переноса. Данные работы содержат результаты математического моделирования течений жидкостей с учетом процессов испарения на границе раздела на основе уравнений Навье-Стокса вязкой несжимаемой жидкости. Условия на поверхности раздела в [8–10] есть результат соотношений на сильном разрыве, законов сохранения массы, импульса, энергии [11–13]. В [14] представлены результаты разрешимости начально-краевых задач для уравнений конвекции Обербека-Буссинеска в случае коэффициента вязкости, зависящего от температуры (см. также цитированную там литературу).

Формулировка условий на термокапиллярной границе раздела в случае зависимости коэффициентов переноса от температуры. Пусть материальная область разделена гладкой поверхностью Γ на две подобласти Ω_1 и Ω_2, заполненные вязкими, несжимаемыми, несмешивающимися жидкостями или жидкостью и смесью газа и пара соответственно. Принадлежность фазе будет обозначаться индексом i, равным «1» или «2». Вывод условий осуществляется на основе ряда гипотез (см. (**I**)–(**IX**)). Согласно постулатам Гиббса [15] граница раздела жидкости и газа представляет собой особую термодинамическую среду, которая характеризуется аддитивными функциями множеств этой поверхности (энтропией, внутренней эрнергией, свободной энергией и др.). При рассмотрении чистых поверхностей без поверхностно-активных веществ такая граница раздела является однопараметрической термодинамической средой, где в качестве параметра состояния выбирается, как правило, абсолютная температура. (**I**) Свободную поверхностную энергию отождествим с коэффициентом поверхностного натяжения $\sigma = \sigma(T)$, следуя Гиббсу. Для большинства чистых поверхностей раздела имеет место линейная зависимость коэффициента поверхностного натяжения $\sigma(T)$ от температуры ($\sigma = \sigma_0 - \sigma_T(T - T_0)$; здесь σ_0 есть значение поверхностного натяжения при температуре T_0; коэффициент σ_T называется температурным коэффициентом поверхностного натяжения; для большинства капельных жидкостей имеем $\sigma_T > 0$). Согласно закону Стокса для несжимаемой жидкости (**II**) справедливо следующее соотношение между тензором напряжений $\mathbf{P}_i$ и тензором скоростей деформации $\mathbf{D}(\mathbf{v}_i)$: $\mathbf{P}_i = -p_i\mathbf{E} + 2\rho_i\nu_i(T_i)\mathbf{D}(\mathbf{v}_i)$, $D_{kl}(\mathbf{v}) = \dfrac{1}{2}(\dfrac{\partial v_k}{\partial x_l} + \dfrac{\partial v_l}{\partial x_k})$ $(k, l = 1, 2, 3)$. Здесь $\mathbf{v}_i$ — вектор скорости, p_i — давление, ρ_i — плотность, T_i — температура, ν_i — коэффициент кинематической вязкости i-ой жидкости ($i = 1, 2$), $\mathbf{E}$ — единичный тензор. Предполагаем дополнительно равенство касательных скоростей ($\mathbf{v}_{1\tau} = \mathbf{v}_{2\tau}$) на границе раздела (**III**). Следуя выбору термодинамических переменных, скрытая теплота испарения может быть определена как скачок энтальпии или как скачок внутренней (потенциальной) энергии $[U]$ [16, 17]. Именно $[U]$ принимается равным скрытой теплоте испарения (**IV**) (см. также [5, 8, 18–20]). Согласно закону Фурье (**V**) вектор потока тепла определяется как $\mathbf{q}\ _i = -\kappa_i(T_i)\nabla T_i$, где κ_i — коэффициент теплопроводности [9, 15]. С использованием закона Фика (**VI**) [15, 21] записывается уравнение диффузии пара в области Ω_2, с помощью которого осуществляется вывод дополнительного соотношения баланса массы на границе раздела. Непрерывность температуры ($T_1 = T_2 = T$) на границе раздела Γ есть еще одно дополнительное соглашение (**VII**), принимаемое в представленном рассмотрении. Если граница раздела Γ отделяет жидкость от ее пара, то условие непрерывности химического потенциала (**VIII**) полагается выполненным на границе раздела как следствие локального термодинамического равновесия [15, 18].

Представим обобщенные кинематическое, динамические и энергетическое условия на термокапиллярной границе в следующем виде:

$$\rho_1(v_{1\,n} - D_n) = \rho_2(v_{2\,n} - D_n) = J_{ev},$$

$$-p_1 + 2\rho_1\nu_1(T)\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\mathbf{v}_1)\mathbf{n} =$$
$$= -p_2 + 2\rho_2\nu_2(T)\,\mathbf{n}\cdot D(\mathbf{v}_2)\mathbf{n} +$$
$$+\rho_2(\frac{\rho_2}{\rho_1} - 1)(v_{2\,n} - D_n)^2 + 2\sigma H,$$

$$2\rho_1\nu_1(T)\tau\cdot\mathbf{D}(\mathbf{v}_1)\mathbf{n} - 2\rho_2\nu_2(T)\,\tau\cdot\mathbf{D}(\mathbf{v}_2)\mathbf{n} = \nabla_\Gamma\sigma\cdot\tau,$$

$$\kappa_1(T)\frac{\partial T_1}{\partial n} - \kappa_2(T)\frac{\partial T_2}{\partial n} -$$
$$-\frac{d^2\sigma}{dT^2}T\frac{dT}{dt} - T\frac{d\sigma}{dT}div_\Gamma \mathbf{v}_1 =$$
$$= \rho_1(v_{1\,n} - D_n)\{[U] + \frac{\rho_1-\rho_2}{\rho_1\rho_2}P_{1\,n}\}+$$
$$= \frac{1}{2}\frac{\rho_1(\rho_2-\rho_1)^2}{\rho_2^2}(v_{1\,n} - D_n)^3 +$$
$$+2\sigma H(1-\frac{\rho_1}{\rho_2})(v_{1\,n} - D_n).$$

Здесь v_{in} — нормальная составляющая вектора скорости ($v_{in} = \mathbf{v}_i\cdot\mathbf{n}$), D_n — скорость смещения границы Γ в направлении нормали $\mathbf{n}$, внешней по отношению к области Ω_1, занятой жидкостью. Имеем $D_n = -\dfrac{F_t}{|\nabla_x F|}$, если Γ задана неявно в виде $F(\mathbf{x},t) = 0$. При этом градиент $\nabla_x F$ вычисляется относительно пространственных переменных $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$. Также введены следующие обозначения: τ — касательный вектор (один из двух касательных векторов в трехмерном случае), $P_{1n} = -p_1 + 2\rho_1\nu_1(T_1)\mathbf{n}\cdot\mathbf{D}(\mathbf{v}_1)\mathbf{n}$ — нормальная составляющая вектора напряжений $\mathbf{P}_1\mathbf{n}$, ∇_Γ — поверхностный градиент ($\nabla_\Gamma = \nabla - \mathbf{n}(\mathbf{n}\cdot\nabla)$), div_Γ — поверхностная дивергенция, для вектора $\mathbf{v}$ имеем $div_\Gamma\mathbf{v} = \nabla_\Gamma\cdot\mathbf{v} = \sum_{i=1}^{3}\Big(\dfrac{\partial}{\partial x_i} - n_i(n\cdot\nabla)\Big)v_i$. H — средняя кривизна поверхности Γ, полагается $H > 0$, если поверхность Γ выпукла наружу области Ω_2.

Следует задать соотношение, определяющее поток пара на границе раздела:

$$(1-C)\rho_2(v_{2\,n} - D_n) = -\chi_d\rho_2\frac{\partial C}{\partial n},$$

или

$$J_{ev} = -\frac{\chi_d}{(1-C)}\rho_2\frac{\partial C}{\partial n},$$

где C — концентрация пара (массовая доля пара), $\chi_d = \chi_d(T)$ — коэффициент диффузии пара в газовой среде Ω_2.

Для завершения постановки задачи требуется определить, исходя из кинетической теории, соотношение, выражающее поток испаряющейся жидкости J_{ev} (**IX**). Кинетическое уравнение Герца–Кнудсена для определения потока массы J_{ev} в результате испарения выражает пропорциональность этого потока разности между давлением насыщенного пара и актуальным парциальным давлением пара в газе (см. [18, 22]):

$$J_{ev} = \frac{\alpha}{\sqrt{2\pi R^g T_I}}\big(P(T_I) - p_s\big). \qquad (1)$$

Здесь R^g — идеальная газовая постоянная, деленная на молярную массу пара; T_I — температура на границе раздела со стороны жидкости; α — коэффициент аккомодации, зависящий от R^g, p_0, T_0 и от феноменологического параметра. Этот феноменологический параметр участвует в условии, определяющем границу раздела и обобщающем обычные соотношения равновесия на границе раздела, записанные для температуры и химического потенциала. Уравнение Клаузиуса–Клапейрона [23, 24], которое выражает давление пара при определенной температуре с помощью скрытой теплоты парообразования, используется в [18] в экспоненциальной форме

$$P(T) = p_0\,exp\big(-\frac{L(T_0)}{R^g}\big(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_0}\big)\big) \qquad (2)$$

и помогает определить температуру насыщенного пара T_s, как $p_s = P(T_s)$. Здесь $L(T_0)$ — скрытая теплота парообразования (испарения) в состоянии равновесия; относительное состояние может быть выбрано как p_s, T_s, благодаря постоянной температуре в предположении о постоянном термодинамическом давлении пара.

В [25, 26] (см. также [8]) соотношение для J_{ev} принимается в виде

$$J_{ev} = \alpha\rho_s L\Big(\frac{M}{2\pi R_g T_s^3}\Big)^{\frac{1}{2}}(T - T_s).$$

Здесь также α — коэффициент аккомодации, L — скрытая теплота испарения, M — молекулярный вес, R_g — универсальная газовая постоянная, T_s —температура насыщенного пара. В настоящей работе следует учесть $L = [U]$, ρ_s — плотность пара $\rho_s = C\rho_2$.

Заключение. Условия на термокапиллярной границе раздела с испарением представляют собой обобщение кинематического, динамического и энергетического условий, принимаемых выполненными на свободной границе. Условия на границе раздела учитывают зависимость коэффициентов кинематической вязкости, теплопроводности и диффузии от температуры. Дальнейшее изучение задач испарительной конвекции связано с получением упрощенных математических моделей на основе параметрического анализа задачи, с построением точных решений для описания двухслойных течений с учетом испарения, исследованием их устойчивости, а также с проведением численных экспериментов на основе упрощенных математических моделей и сравнением результатов с экспериментальными данными.

Библиографический список

1. Белова И.В. Численные исследования напряжений в твердой фазе в процессе кристаллизации : дисс. ... канд. физ-мат. наук. — Новосибирск, 1990.

2. Гончарова О.Н. Математическая модель формирования сферических оболочек в условиях кратковременной невесомости // Динамика сплошной среды. — 1987. — № 82.

3. Гончарова О.Н., Пухначёв В.В. Диффузионное приближение в задаче формирования сферических микробаллонов в условиях кратковременной невесомости // Моделирование в механике. — 1990. — № 4 (21).

4. Гончарова О.Н. Глобальная разрешимость задачи о формировании сферических микробаллонов // Динамика сплошной среды. — 1993. — № 106.

5. Das K.S., Ward C.A. Surface thermal capacity and its effects on the boundary conditions at fluid-fluid interfaces // Phys. Rev. E. — 2007. — V. 75, 065303.

6. Кузнецов В.В. Условия переноса тепла и массы на границе раздела жидкость-газ при диффузионном испарении // Journal of Siberian Federal University. — 2010. — № 3 (2).

7. Кузнецов В.В. Тепломассообмен на поверхности раздела жидкость-пар // Механика жидкости и газа. — 2011. — № 5.

8. Гончарова О.Н. Моделирование течений в условиях тепло- и массопереноса на границе раздела // Известия Алтайского. гос. ун-та. — 2012. — № 73 (1/2).

9. Iorio C.S., Goncharova O.N., Kabov O.A. Study of evaporative convection in an open cavity under shear stress flow // Microgravity Sci. Technol. — 2009. — V. 21 (1).

10. Iorio C.S., Goncharova O.N., Kabov O.A. Heat and mass transfer control by evaporative thermal pattering of thin liquid layers // Computational Thermal Sci. — 2011. — V. 3 (4).

11. Овсянников Л.В. Введение в механику сплошных сред. — Новосибирск, 1976. — Ч. 1 ; 1977. — Ч. 2.

12. Серрин Дж. Математические основы классической механики жидкости. — М., 1963.

13. Седов Л.И. Введение в механику сплошной среды. — М., 1962.

14. Гончарова О.Н. О единственности решения двумерной нестационарной задачи для уравнений свободной конвекции с вязкостью, зависящей от температуры // Дифференциальные уравнения. — 2002. — Т. 38. № 3.

15. Андреев В.К., Гапоненко Ю.В., Гончарова О.Н., Пухначёв В.В. Современные математические модели конвекции. — М., 2008.

16. Haase R. Thermodynamics of irreversible processes. — Mineola NY, 1990.

17. Bedeaux D., Hermans L.J.F., Ytrehus T. Slow evaporation and condensation // Physica A. — 1990. — V. 169.

18. Colinet P., Lebon G., Iorio C.S., Legros J.C. Interfacial nonequilibrium and Benard-Marangoni instability of a liquid-vapor system // Phys. Rev. E. — 2003. — V. 68.

19. Ghez R. A generalized Gibbsian surface // Surface sciences. — 1966. — V. 4.

20. Dufay R., Prigogine I. Surface tension and adsorption. — New York, 1966.

21. De Groot S.R., Mazur P. Non-equilibrium thermodynamics : 2nd, edn. — Amsterdam, 1962.

22. Haut B., Colinet P. Surface-tension-driven instability of a liquid layer evaporating into an inert gas // J. of Colloid and Interface Science. — 2005. — № 285.

23. De Groot S.R., Mazur P. Non-equilibrium thermodynamics. — Amsterdam, 1962.

24. Prigogine I., Dufay R. Chemical thermodynamics. — London ; New York, 1954.

25. Oron A., Davis S.H., Bankoff S.G. Long-scale evolution of thin liquid films // Reviews of Modern Physics. — 1997. — V. 69 (3).

26. Мирзаде Ф.Х. Волновая неустойчивость слоя расплавленного металла, образующегося при интенсивных лазерных воздействиях // ЖТФ. — 2005. — Т. 75 (8).