

## О КИНЕТИКЕ ФАЗОВОГО ПЕРЕХОДА ПРИ НАЛИЧИИ ДЖОУЛЕВОЙ ДИССИПАЦИИ

А. С. Плешанов

(Москва)

Фазовый переход при наличии объемного тепловыделения имеет место при электрическом пробое конденсированных сред, при электрическом взрыве проводников, при разнообразных коммутационных процессах. В [1, 2] упоминается, что в условиях объемного тепловыделения фазовый переход включает область сосуществования фаз. Однако влияние объемного тепловыделения на кинетику фазового перехода, насколько нам известно, не исследовалось. Данная работа содержит теоретический анализ такого влияния.

Пусть через слой конденсированного вещества пропускается электрический ток плотности  $j$ . Вследствие джоулевой диссипации температура  $T$  слоя повышается. Нестационарное распределение  $T$  находится из одномерного уравнения теплопроводности

$$(1) \quad \rho w_t = (\kappa T_x)_x + j^2/\sigma,$$

где  $w = w^0 + cT$  — энтальпия ( $w^0$  — уровень отсчета  $w$ ,  $c$  — теплоемкость);  $\rho$  — плотность;  $\kappa$  — коэффициент теплопроводности;  $\sigma$  — электропроводность;  $x$  — координата поперек слоя; индексы означают дифференцирование. Начальное условие в момент времени  $t = 0$  имеет вид

$$(2) \quad T(x, 0) = T_0,$$

а граничное условие, соответствующее теплообмену по Ньютону с внешней средой при  $T = T_0$ :

$$(3) \quad [\kappa T_x + \alpha(T - T_0)]|_d = 0$$

( $\alpha$  — коэффициент теплообмена,  $d$  — полуширина слоя). При достижении  $T_{\max}$  значения температуры фазового перехода  $T_*$  появляется новая фаза, процесс распространения тепла в которой описывается уравнением, аналогичным (1). На границе фаз выполняются условия непрерывности  $j$ , потоков массы и энергии, а также непрерывности потенциала  $\varphi$  и  $T$ :

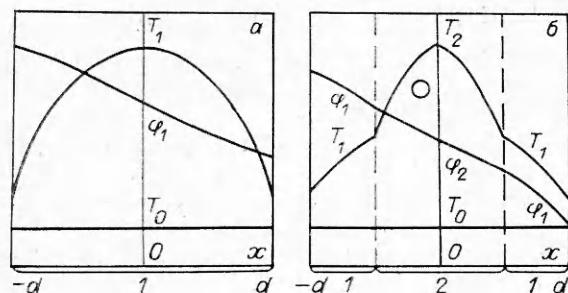
$$(4) \quad \{j\} = \{\rho v\} = \{\rho v w - \kappa T_x\} = 0, \quad \{\varphi\} = \{T\} = 0.$$

Здесь  $v$  — скорость относительно стыка и  $\{f\} = f_2 - f_1$  (индексы  $\alpha = 1, 2$  относятся к первоначальной и новой фазам соответственно). Примерные распределения  $\varphi$  и  $T$  по слою в условиях одинакового теплообмена на его границах изображены на рис. 1.

На самом деле при достижении  $T_{\max}$  значения  $T_*$  в условиях данной задачи, где тепло подводится к слою объемно и с конечной скоростью, требуется некоторое время на перевод фазы 1 в фазу 2. Из (1) следует уравнение, описывающее этот нестационарный процесс при  $T_1 = T_2 = T_*$ :

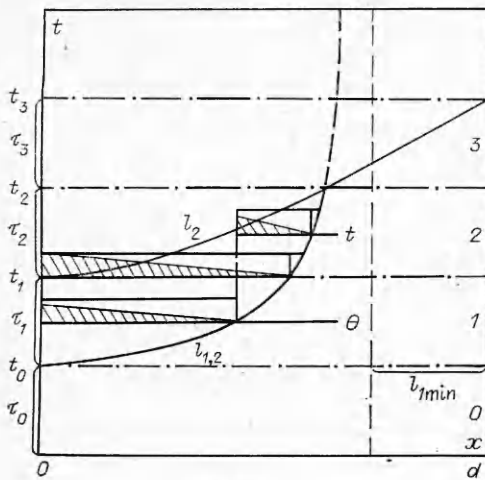
$$(5) \quad \rho w_{*t} = j^2/\sigma_*,$$

где  $w_* = \sum_{\alpha} w_{\alpha*} x_{\alpha} = w_{1*} + (w_{2*} - w_{1*}) x_2 = w_{1*} + \Delta w_* x_2$ ;  $\sigma_* = \sum_{\alpha} \sigma_{\alpha*} x_{\alpha} =$

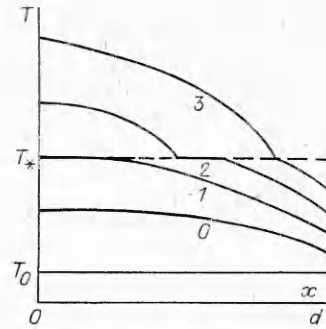


Р и с. 1

$= \sigma_{1*} + (\sigma_{2*} - \sigma_{1*}) x_2 \equiv \sigma_{1*} + \Delta \sigma_* x_2$ ,  $x_{\alpha}$  — объемная доля фазы  $\alpha$ , совпадающая в силу равенства молекулярных весов обеих фаз с ее массовой долей (предполагается, что  $\sigma_{\alpha}$  пропорциональна объемной плотности носителей заряда  $n$ ); индекс \* подразумевает  $T = T_*$ . Здесь используется аддитивная формула для проводимости смеси, дающая минимальное



Р и с. 2



Р и с. 3

тивления находится между этими предельными значениями. Интеграл (5) при  $j = \text{const}$  имеет вид

$$(6) \quad \rho \Delta w_* (\sigma_1 x_2 + \Delta \sigma_* (1/2) x_2^2) = j^2 (t - \theta)$$

( $\theta$  — постоянная интегрирования, соответствующая моменту появления фазы 2 ( $x_2 = 0$ ));  $\tau_1 = (t - \theta)_{\text{max}}$  получается из условия исчезновения фазы 1 ( $x_2 = 1$ );  $t_0 = \theta_{\text{min}}$  отвечает моменту времени, когда впервые выполняется условие  $T_1(0, t_0) = T_*$ . В момент времени  $t_1 = t_0 + \tau_1$  в центре слоя полностью исчезает фаза 1, после чего от центра идет фронт скачкообразного перехода фазы 1 в фазу 2 с убывающим значением концентрации  $x_{2*}$  на этом фронте со стороны области сосуществования фаз;  $x_{2*}$  находится из (6) при отождествлении полуширины фазы 2, равной  $l_2(t)$ , с координатой переднего фронта области сосуществования фаз в момент  $\theta$ , равной  $l_{1,2}(\theta)$ . Кроме того, используются граничное условие симметрии и условия

$$(7) \quad T_{2,x}(0, t) = 0, \quad T_2|_{l_2} = T_*, \quad (x_2 T_{2,x} + \rho \Delta w_* x_{1*} l_{2,t})|_{l_2} = 0.$$

Что касается определения  $l_{1,2}(t)$ , то она находится из температурного поля в фазе 1 при граничных условиях (3) и

$$(8) \quad T_1|_{l_{1,2}} = T_*, \quad T_{1,x}|_{l_{1,2}} = 0.$$

Последнее условие (8) — следствие отсутствия градиента в области сосуществования фаз. Задний фронт области сосуществования фаз, определяемый  $l_2(t)$ , нагоняет передний фронт, пока, наконец, область сосуществования фаз не исчезнет, после чего картина распределения  $T$  будет совпадать с рис. 1, б. Таким образом, между стадией прогрева слоя до достижения  $T_1(0, t)$  значения  $T_*$  (стадия 0) и стадией нестационарного перехода из фазы 1 в фазу 2 (стадия 3) существуют стадия формирования области сосуществования фаз из центра слоя к его периферии (стадия 1) и стадия одновременного наличия отдельных фаз 1 и 2, разделенных сокращающейся областью сосуществования фаз (стадия 2). Качественная диаграмма  $x - t$  с эюрами  $x_2$  представлена на рис. 2, примерные распределения  $T$  в разных стадиях — на рис. 3.

Математическое описание данного нестационарного процесса с нелинейными граничными условиями на заранее неизвестных границах фаз  $l_{1,2}(t)$  и  $l_2(t)$  даже в модельной ситуации постоянства  $\sigma_\alpha$  ( $\sigma_1 \neq \sigma_2$ ) и условия  $\rho_1 = \rho_2$ , что в дальнейшем предполагается, достаточно сложно. Простым и, как будет показано ниже, достаточно точным методом исследования является метод интегральных балансов, когда уравнения (1) удовлетворяют-

ся в интегральной форме

$$(9) \quad \int_{l_{12}}^d \rho_1 w_{1,t} dx = \kappa_1 T_{1,x} \Big|_{l_{12}}^d + j^2 \int_{l_{12}}^d \frac{dx}{\sigma_1};$$

$$(10) \quad \int_0^{l_2} \rho_2 w_{2,t} dx = \kappa_2 T_{2,x} \Big|_0^{l_2} + j^2 \int_0^{l_2} \frac{dx}{\sigma_2},$$

а профили  $T_\alpha$  берутся в виде парабол по  $x$

$$(11) \quad T_\alpha = a_\alpha + b_\alpha x + c_\alpha (1/2)x^2$$

е коэффициентами, зависящими от  $t$  и определяемыми из граничных условий. Нетрудно убедиться, что система уравнений (9), (10) вместе со всеми граничными условиями замкнута относительно шести коэффициентов (11) и двух законов движения  $l_{12}$  и  $l_2$ . Основанием для использования степенной аппроксимации (11) служит то, что решение вида (11) при постоянных коэффициентах  $\rho\sigma$ ,  $\kappa$  и  $j^2/\sigma$  — частное точное решение (1), асимптотически верное при  $t \rightarrow \infty$ .

Точность метода интегральных балансов продемонстрируем на автономной задаче, имеющей точное решение. Пусть на слой вещества при  $T = T_*$  действует электрическое напряжение  $U = \text{const}$ , которое падает только на появляющейся новой фазе. Уравнение (1) примет вид

$$(12) \quad \rho w_t = (\kappa T_x)_x + \frac{1}{6} \left( \frac{U}{\int_0^l dx/\sigma} \right)^2$$

( $l$  — ширина новой фазы). Температура  $T$  удовлетворяет граничным условиям

$$(13) \quad T_x(0, t) = 0, \quad T|_l = T_*, \quad (\kappa T_x + \rho \Delta w_* l_t)|_l = 0.$$

Ищем решение (12) в форме  $T = T_* + (T_m - T_*)f(\xi)$ , где  $T_m = T(0, t) = \text{const}$ ;  $\xi = x/(2\sqrt{\chi t})$  — автомодельная переменная. Очевидно,  $f(0) = 1$  и  $f(\eta) = 0$  ( $\eta = l/(2\sqrt{\chi t})$ ). При  $\rho\sigma$ ,  $\kappa = \text{const}$

$$f_{\xi\xi} + 2\xi f_\xi + \frac{1}{\kappa\sigma(T_m - T_*)} \left( \frac{U}{\int_0^\eta d\xi/\sigma} \right)^2 = 0,$$

а при  $\sigma = \text{const}$  имеем точное решение

$$f = \left[ \frac{U}{\sqrt{\kappa/\sigma}(T_m - T_*)} \right]^2 \frac{1}{\eta^2} \int_{\xi}^{\eta} \exp(-\xi'^2) \left( \int_0^{\xi'} \exp(\xi''^2) d\xi'' \right) d\xi',$$

которое при  $\xi = 0$  связывает  $T_m$  и  $\eta$ ;  $\eta$  находится согласно (13) из

$$(14) \quad \eta \sqrt{\frac{\eta}{D(\eta)}} = \bar{U} \equiv \frac{U}{\sqrt{2(\kappa/\sigma)(\Delta w_*/c)}}$$

( $D(\eta) = \exp(-\eta^2) \int_0^\eta \exp(\xi^2) d\xi$  — интеграл Досона [3]). Метод интегрального баланса дает в данном случае соотношение

$$(15) \quad \bar{U} = \eta \sqrt{1 + (2/3)\eta^2}.$$

На рис. 4 приведены зависимости точного  $\eta_1$  и приближенного  $\eta_2$  решений от параметра  $\bar{U}$ . Расхождение решений начинается с  $\eta \geq 1$ , при этом метод интегрального баланса дает большее значение  $\eta$ , т. е. более интенсивное движение границы фазового перехода. Причина хорошей

аппроксимации демонстрируется степенными разложениями (14), (15)

$$\bar{U} = \eta(1 + (1/3)\eta^2 + (1/30)\eta^4 - \dots),$$

$$\bar{U} = \eta(1 + (1/3)\eta^2 - (1/18)\eta^4 + \dots).$$

Отметим, что решение (15) — частное решение соответствующего нелинейного дифференциального уравнения; общее решение этого уравнения не удовлетворяет начальному условию при произвольных конечных значениях параметров задачи.

Точность метода интегрального баланса можно проверить и при исследовании стадии прогрева слоя (стадия 0) в том же предположении постоянства всех коэффициентов. Точное решение (1) при условиях  $T_1(x, 0) = T_0$ ,  $T_{1,x}|_0 = 0$ ,  $[\kappa_1 T_{1,x} + \alpha(T_1 - T_0)]|_x = 0$ , полученное аналогично [4], имеет вид

$$(16) \quad T_1 - T_0 = 2 \frac{(jd)^2}{(\kappa\sigma)_1} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \lambda_n d}{(\lambda_n d)^3} (1 - \exp(-\lambda_n^2 \chi_1 t)) \cos \lambda_n x \equiv \\ \equiv \frac{(jd)^2}{(\kappa\sigma)_1} \left\{ \left[ \frac{1}{N_d} + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{x^2}{d^2} \right) \right] - 2 \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\sin \lambda_n d}{(\lambda_n d)^3} \exp(-\lambda_n^2 \chi_1 t) \cos \lambda_n x \right\}.$$

Здесь собственные значения  $\lambda_n$  удовлетворяют характеристическим уравнениям  $\lambda_n d \operatorname{tg} \lambda_n d = N_d$ ;  $\chi_1 = (\kappa/\rho c)_1$  — температуропроводность;  $N_d = \alpha d/\kappa_1$  — число Пусселя; член в квадратных скобках — стационарное решение (1) при  $t \rightarrow \infty$ , если  $T_{\max} < T_*$ . Решение (1), найденное методом интегрального баланса, запишем как

$$(17) \quad T_1 - T_0 = \frac{(jd)^2}{(\kappa\sigma)_1} \left[ \frac{1}{N_d} + \frac{1}{2} \left( 1 - \frac{x^2}{d^2} \right) \right] (1 - \exp(-t/\tau_t))$$

( $\tau_t = (1/3 + 1/N_d)d^2/\chi_1$  — тепловое время).

Сопоставление (16) и (17) приводит к выводу, что метод интегрального баланса эквивалентен приближению регулярного режима, когда из ряда (16) учитывается первая экспонента. Момент достижения  $T_1(0, t)$  значения  $T_*$  получается из (17) в виде

$$(18) \quad t_0 \equiv \tau_0 = -\tau_t \ln [1 - (j_*/j)^2] \\ \left( j_* = \frac{1}{\sqrt{1 + 2/N_d}} \frac{1}{d} \sqrt{2(\kappa\sigma)_1(T_* - T_0)} < j - \text{масштаб тока} \right), \text{ при этом}$$

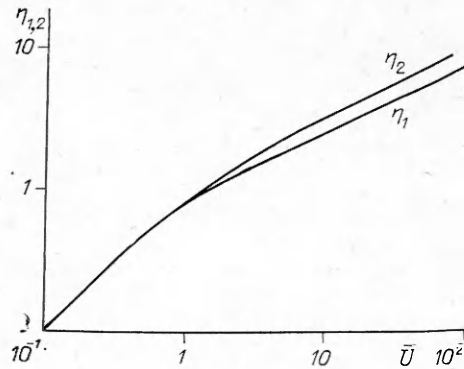
уравнение интегрального баланса тепла при  $t = t_0$  имеет вид

$$(19) \quad Q_{1,t}|_{t_0} \equiv (\rho c)_1 \int_0^d T_{1,t}|_{t_0} dx = \frac{d}{\sigma_1} (j^2 - j_*^2) > 0.$$

Следующая стадия формирования области сосуществования фаз (стадия I) описывается решением (6), откуда вытекает продолжительность этой стадии

$$(20) \quad t_1 - t_0 \equiv \tau_1 = \frac{\rho \Delta w_*}{j^2} \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2).$$

Координата переднего фронта области сосуществования фаз  $l_{12}$  находится методом интегрального баланса с помощью представления  $\frac{T_1 - T_0}{T_* - T_0} =$



Р и с. 4

$= 1 - \frac{1}{1 + 2/N_1} \left( \frac{\kappa - l_{12}}{l_1} \right)^2$ , удовлетворяющего граничным условиям (3) и (8). Здесь  $l_1$  — ширина фазы 1 ( $l_{12} + l_1 = d$ );  $N_1 = \alpha l_1 / \kappa_1$ :

$$(21) \quad \frac{N_1(N_1 + 4)}{N_1 + 2} N_{1,t} = - \frac{3}{1/2 + 1/N_d} \frac{\chi_1}{d^2} [(j/j_*)^2 N_1(N_1 + 2) - N_d(N_d + 2)]$$

с начальным условием  $N_1(t_0) = N_d$ . Аналогично (19)

$$\frac{N_d(N_d + 4)}{N_d + 2} N_{1,t} \Big|_{t_0} = - \frac{3}{1/2 + 1/N_d} \frac{\chi_1}{d^2} N_d(N_d + 2)[(j/j_*)^2 - 1] < 0.$$

Интеграл (21) имеет вид

$$(22) \quad \sum_{i=1}^3 a_i \ln \frac{N_1 - N_{1i}}{N_d - N_{1i}} + \frac{3}{1/2 + 1/N_d} \frac{\chi_1}{d^2} \left( \frac{j}{j_*} \right)^2 (t - t_0) = 0,$$

где  $N_{1i}$  — соответствующие корни;  $a_i$  — величины, определяемые методом неопределенных коэффициентов. В частном случае  $N_d \gg 1$  получается простой интеграл

$$(23) \quad \ln \left[ \frac{(j/j_*)^2 (l_1/d)^2 - 1}{(j/j_*)^2 - 1} \right] + 12 \left( \frac{j}{j_*} \right)^2 \frac{\chi_1}{d^2} (t - t_0) = 0,$$

откуда следует, что  $l_{1\min}/d = j_*/j < 1$ . Аналогично и в общем случае (22)  $N_1$  убывает от значения  $N_d$  до  $N_{1\min} = \sqrt{1 + (j_*/j)^2 N_d(N_d + 2)} - 1 < N_d$ . Таким образом, область сосуществования фаз не выходит на границу слоя.

В момент времени  $t = t_1$  от центра слоя начинает распространяться фронт скачкообразного перехода в фазу 2. Значение концентрации фазы 2  $x_{2*}$  на этом фронте со стороны области сосуществования фаз получается путем исключения  $\theta$  из (6) и (22) или (23) (где полагается  $t = \theta$ ) при условии  $l_1 = d - l_2$ . Например, при использовании (23)

$$(24) \quad \frac{\rho \Delta w_*}{j^2} \left( \sigma_1 x_{2*} + \Delta \sigma \frac{1}{2} x_{2*}^2 \right) + \frac{1}{12} \left( \frac{j_*}{j} \right)^2 \frac{d^2}{\chi} \ln \left[ \frac{(j/j_*)^2 - 1}{(j/j_*)^2 (l_1/d)^2 - 1} \right] = t - t_0$$

( $t_1 \leq t \leq t_2$ ), продолжительность стадии 2 определяется из условия  $x_{2*} = 0$  и равна

$$(25) \quad t_2 - t_1 \equiv \tau_2 = \frac{1}{12} \left( \frac{j_*}{j} \right)^2 \frac{d^2}{\chi_1} \ln \left[ \frac{(j/j_*)^2 - 1}{(j/j_*)^2 (l_1/d)^2 - 1} \right] - \tau_1.$$

Исходя из представления  $T_2 - T_* = \frac{\tau_{2*}}{2\kappa_{2,2}} (l_2^2 - x^2)$ , удовлетворяющего граничным условиям (7) ( $q_{2*} = \rho \Delta w_* x_{1*} l_{2,t}$ ), получим уравнение интегрального баланса тепла

$$(26) \quad \frac{1}{3\chi_2} (q_{2*} l_2^2)_t + q_{2*} = \frac{j^2}{\sigma_2} l_2,$$

из которого ввиду определения  $q_{2*}$  с использованием (24) можно найти  $l_2$ . При малых  $t - t_1$  скорость

$$(27) \quad l_{2,t} = 12 \frac{\chi_1}{d} \left[ \left( \frac{j}{j_*} \right)^2 - 1 \right] > 0.$$

она оказывается постоянной и значительно больше тепловой скорости  $\chi_1/d$ .

Заключительная стадия 3 описывается уравнением (26) для фазы 2 и аналогичным уравнением для фазы 1, которое вытекает из общего баланса тепла

$$(28) \quad (\rho c)_1 \int_{l_2}^d T_{1,t} dx = \kappa_1 T_{1,x} \Big|_{l_2}^d + \frac{j^2}{\sigma_1} l_1$$

и представления (11)

$$(29) \quad T_1 = T_* - \frac{q_{1*}}{\kappa_1} (x - l_2) - \frac{1}{1 + 2/N_1} \left[ (T_* - T_0) - \left( 1 + \frac{1}{N_1} \right) \frac{q_{1*}}{\kappa_1} l_1 \right] \left( \frac{x - l_2}{l_1} \right)^2,$$

удовлетворяющего граничным условиям (3) и

$$(30) \quad T_1|_{l_2} = T_*, \quad -\kappa_1 T_{1,x}|_{l_2} = q_{1*}.$$

Введенные тепловые потоки  $q_{\alpha*}$  удовлетворяют граничному условию

$$(31) \quad q_{2*} - q_{1*} = \rho \Delta w_* l_{2,t}.$$

Система уравнений (26), (28) и (31) относительно  $q_{\alpha*}$  и  $l_2$  замкнута.

Стадия 3 завершается выходом границы фазового перехода на границу слоя (в момент времени  $t = t_3$ ), после чего процесс описывается единым для слоя уравнением (1) для фазы 2 до наступления следующего фазового перехода. Впрочем, второй и последующие фазовые переходы возможны и до завершения первого.

Автор благодарит Ю. Н. Вершинина за дискуссии.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Бакулин Ю. Д., Куропатенко В. Ф., Лучинский А. В. Магнитогидродинамический расчет взрывающихся проводников // ЖТФ.— 1976.— Т. 46, № 9.
2. Бурцев В. А., Калинин Н. В. Численное моделирование электрического взрыва проводников.— Л., 1983.— (Препринт/НИИЭФА; № К—0623).
3. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стигана.— М.: Наука, 1979.
4. Тихонов А. Н., Самарский А. А. Уравнения математической физики. М.: ГИТТЛ, 1953.

Поступила 18/V 1987 г.

УДК 533.6.011.8

#### ВРЕМЯ ВРАЩАТЕЛЬНОЙ РЕЛАКСАЦИИ АЗОТА

А. Е. Беликов, И. Ю. Соловьев,  
Г. И. Сухинин, Р. Г. Шарафутдинов  
(Новосибирск)

Теоретическое описание вращательной релаксации может быть осуществлено с помощью уравнений Ванг-Чанга — Уленбека для одночастичной функции распределения  $f_j(\mathbf{v}, \mathbf{r}, t)$  [1], где  $j$  — вращательное квантовое число,  $\mathbf{v}, \mathbf{r}$  — скорость и координата,  $t$  — время. Когда характерное время вращательной релаксации существенно больше характерного времени установления равновесного распределения поступательной энергии молекул, функция распределения  $f_j$  представляется в виде произведения  $f_j = f(\mathbf{r}, \mathbf{v}, t) N_j(\mathbf{r}, t)$ . В этом случае релаксация  $N_j(\mathbf{r}, t)$  происходит при равновесном распределении поступательной энергии и описывается системой кинетических уравнений [2]. В настоящее время отсутствует надежная информация о константах скоростей вращательных переходов, входящих в эти уравнения, что затрудняет расчеты поуровневой кинетики.

Для менее детального описания часто используется релаксационное уравнение

$$(1) \quad dE_R/dt = -(E_R - E_t)/\tau_R,$$

справедливое для малых отклонений от равновесия ( $E_R$  и  $E_t$  — текущее и равновесное значение вращательной энергии,  $\tau_R$  — время вращательной релаксации).

Время вращательной релаксации определялось из различного типа экспериментов (ультразвук, ударные волны, термотранспирация и т. д.), в том числе из измерений параметров в свободной струе [3]. При интерпретации экспериментов обычно предполагалось, что уравнение (1) справедливо во всем течении, хотя в свободных струях могут быть достигнуты значительные отклонения от равновесия, что ставит под сомнение