

重庆大学

数学建模校内竞赛论文



论文题目：水滴蒸发过程的物理场模拟

组号：8127

成员：蒋静蕊，刘力兴，夏天

选题：A 题 一滴水的蒸发过程

姓名	学院	年级	专业	学号	联系电话	数学分析	高等代数	微积分	高等数学	线性代数	概率统计	数学实验	数学模型	CET4	CET6
蒋静蕊	计算机学院	2021 级	信息安全	20211701	15737221361	90				99				525	476
刘力兴	数统学院	2021 级	数学大类	20211419	17378311237	91	80							441	
夏天	自动化学院	2021 级	机器人工程	20213485	13699052548				95	85	82			575	507

2023 年 5 月 26 日

水滴蒸发过程的物理场模拟

摘要

本文研究的是水滴在密闭容器内蒸发过程中，周围空气湿度、水滴的体积、水滴表面温度如何变化的物理场模拟问题。

针对问题一，将蒸发过程视为一个纯蒸汽扩散过程。我们根据发散场的**线性叠加原理**，利用水滴的对称性，将平面上的水滴等效为上下两个对称水滴的拼接，以此来弱化边界条件。然后将整个容器划分为若干小矩体，以水滴表面的浓度分布为 **Dirichlet 边界条件**，并假定每秒的边界条件保持恒定，代入 **Fick 定律**，利用**有限差分法**求解水滴周围的湿度变化。然后再通过空气湿度变化量对体积进行积分，可得到空气中水分子摩尔量的变化，将其代入水滴的形状—体积—摩尔量模型中，求解出下一时刻的蒸发模型的边界条件，以此迭代，通过**数值模拟法**得到整个水滴蒸发过程中的湿度变化。

针对问题二，在问题一的基础上，我们可以通过将空气湿度关于体积的积分再对时间进行求导，得到空气中水分子摩尔量关于时间的变化函数，再将所得的结果代入水滴的形状—体积—摩尔量模型中，得到水滴体积随时间的变化函数。

针对问题三，通过分析水滴蒸发过程中的能量转化，以潜热能、表面张力势能、大气压力做功、和空气中水分子的能量变化构建**能量守恒关系式**。问题二中空气中水分子摩尔量关于时间的变化函数代入**潜热公式**中，求解出水滴表面**热流密度**关于时间的变化。由于水滴表面的温度平衡具有瞬时性，即在每一时刻的温度分布可以看作是一个稳态模型，所以可以将热流密度代入 **Fourier 定律**建立新的能量守恒关系式得到温度的 **Neumann 边界条件**。之后代入空气的热传导方程，在问题一中所构建的物理场中，利用**有限差分法**对偏微分方程的求解，得到水滴表面的温度变化。

针对问题四，需要将新的温度条件代入模型重新求解，通过比较不同温度下与前三问结果的差异，来分析模型的优良程度。

最后，我们对模型进行了优缺点分析和推广。

关键字： 线性叠加原理 Fick 定律 热传导方程 Fourier 定律 数值模拟法

一、问题重述

1.1 背景资料

水滴蒸发是一种复杂的物理现象，它受到多种因素的影响，如环境温度、湿度、气压、水滴表面积、水滴体积等。在任何时刻，水滴表面上的水分子都在不停地运动，有些分子具有比平均动能还大的动能，如果它们位于液体的表面，就能脱离液体表面向外飞出，变成水蒸气。飞出去的分子有可能和其他分子碰撞又返回液体表面或内部。如果飞出去的分子多于飞回来的分子，液体就在蒸发。

就温度而言，随着环境温度的增加，水分子的运动速度加快，从而逸出液体表面的分子数量增加。水面上方空气的湿度增加，其中的水汽分子数量增加，饱和水汽压力差减小。水面与大气的水汽压差越小，水分子由水面逸出的速度越慢。

本实验在一个边长为 10 厘米的正方体容器中滴入一滴纯净水后密闭，将环境温度控制在 20°C ，研究水滴在密闭容器中的蒸发过程。我们需要建立数学模型来描述水滴从落入容器开始到最后完全蒸发各个时刻水滴周围空气中的湿度、水滴体积和表面温度的变化规律。

因此，本实验旨在通过建立数学模型，研究水滴在密闭容器中的蒸发过程，探究环境温度对水滴蒸发的影响，为相关领域的研究提供理论基础和实验依据。

1.2 需要解决的问题

我们通过分析微观状态，运用数学思想，建立数学模型来研究水滴蒸发过程中的下列问题：

- (1) 描述从水滴落入容器开始到最后完全蒸发各个时刻水滴周围空气中的湿度变化规律。
- (2) 描述从水滴落入容器开始到最后完全蒸发各个时刻水滴体积的变化规律。
- (3) 描述从水滴落入容器开始到最后完全蒸发各个时刻水滴表面温度的变化规律。
- (4) 如果环境温度控制在 25°C ，上述三个小问中的规律会如何变化？

二、问题分析

2.1 问题一分析

问题一要求研究蒸发过程中各个时刻水滴周围空气中的湿度变化规律。我们的思路图如下所示：

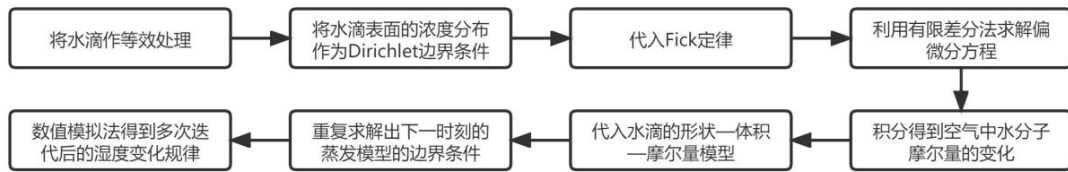


图 1 问题一流程图

2.2 问题二分析

问题二要求我们分析蒸发过程中各个时刻水滴体积的变化规律。我们可以在第一问的基础上，通过将空气湿度关于体积的积分再对时间进行求导，得到空气中水分子摩尔量关于时间的变化函数，再将所得的结果代入水滴的形状—体积—摩尔量模型中，即可得到水滴体积随时间的变化函数。

2.3 问题三分析

问题三要求我们分析蒸发过程中各个时刻水滴表面温度的变化规律。我们的思路图如下所示：

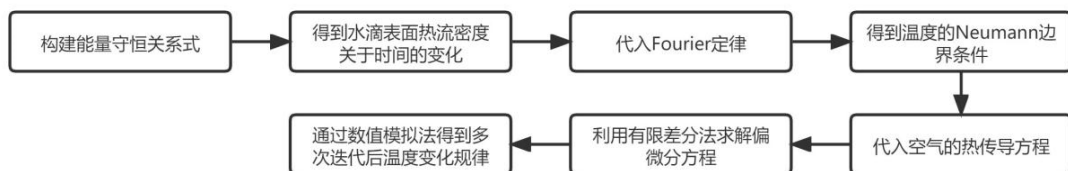


图 2 问题三流程图

2.4 问题四分析

问题四要求分析当环境温度更改为 25°C 后上述三个小问中的变化规律。所以我们只需要将新的温度条件代入模型重新求解即可，通过比较不同温度下模型的差异，来分析模型的优良程度。

三、模型的假设

1. 空气气压 P_0 为标准大气压，空气和水滴的初始温度为 $T_0=20^{\circ}\text{C}$ ，相对湿度通常取 $RH=50$
2. 研究范围为边长 10 厘米的正方体容器内部空间，水滴的位置假设在容器底面的正中央，容器假设为实验时常用的玻璃容器。

3. 玻璃容器中水滴接触角取 30° ，水滴蒸发模式为恒定接触半径蒸发模式（CCR），在此模式下，液滴接触半径保持不变，接触角将逐渐减小到 0。[2]
4. 实验时一滴水的体积 V_0 一般取为 0.05ml。
5. 将水滴形状视为球冠状，水分子与玻璃的碰撞视为弹性碰撞。[3]

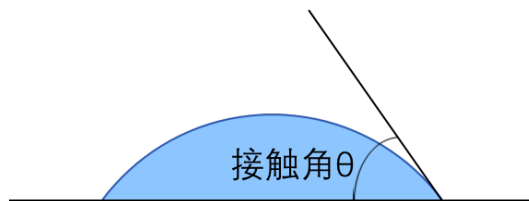


图 3 水滴接触角模型

6. 忽略容器壁对水滴蒸发的影响，忽略重力对空气分子的影响，忽略气液界面曲率尺度效应。[4][6]
7. 常温常压下，空气视作理想气体，满足理想气体状态方程：

$$PV = nRT \quad (1)$$

四、符号说明

符号	意义
D	扩散系数
k	导热率
P_0	标准大气压
P_1	水的饱和蒸汽压
r_0	球冠底面半径
R	球体半径
h	球冠高度
c_0	水蒸气饱和浓度
c_1	环境水蒸气浓度初值
M	水分子摩尔质量
n	空间中水分子总量
q	热流密度
d	散点距离
α	热传导系数
L	潜热系数
k'	斜率

五、模型的建立与求解

5.1 物理背景

5.1.1 Fick 第一定律

Fick 在 1855 年提出：在单位时间内通过垂直于扩散方向的单位截积的扩散物质流量（称为扩散通量，用 J 表示）与该截面处的浓度梯度成正比，也就是说，浓度梯度越大，扩散通量越大。这就是 Fick 第一定律，它的数学表达式如下：

$$J = -D \frac{dc}{dx} \quad (2)$$

式中， D 称为扩散系数 (m^2/s)，扩散系数 D 是描述扩散速度的重要物理量，它相当于浓度梯度为 1 时的扩散通量， D 值越大则扩散越快； c 为浓度梯度，负号表示扩散方向为浓度梯度的反方向，即扩散组元由高浓度向低浓度区扩散；扩散通量 J 的单位是 $\text{kg}/\text{m}^2 \cdot \text{s}$ 。

菲克第一定律只适用于 $\frac{dc}{dx}$ 和 J 不随时间变化——稳态扩散的场合。对于稳态扩散也可以描述为：在扩散过程中，各处的扩散组元的浓度 c 只随距离 x 变化，而不随时间 t 变化。这样，扩散通量 J 对于各处都一样，即扩散通量 J 不随距离 x 变化，每一时刻从前边扩散来多少原子，就向后边扩散走多少原子，没有盈亏，所以浓度不随时间变化。

但实际上，大多数扩散过程都是在非稳态条件下进行的。非稳态扩散的特点是：在扩散过程中， $\frac{dc}{dx}$ 和 J 都随时间变化。通过各处的扩散通量 J 随着距离 x 在变化，而稳态扩散的扩散通量则处处相等，不随距离而发生变化。对于非稳态扩散，就要应用菲克第二定律了。

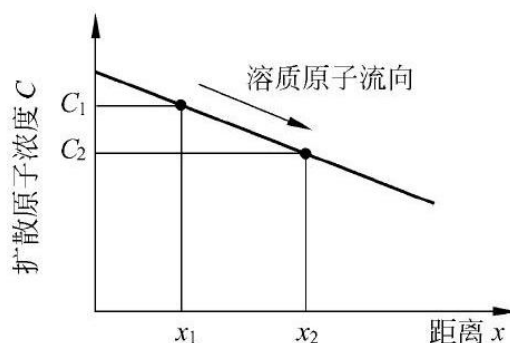


图 4 稳态扩散实例

5.1.2 Fick 第二定律

绝大多数扩散过程属于非稳态扩散，本题的水滴蒸发过程也不例外。在扩散过程中任一点的浓度随时间而变化 ($\frac{\partial c}{\partial t} \neq 0$)。在非稳态扩散系统中，取体积元 $A\Delta x$ (A 为截面积)，用 J_x 和 $J_{x+\Delta x}$ 分别表示流入体积元和从体积元流出的扩散通量，则在 Δt 时间内，体积元中扩散物质的积存量应为：

$$\Delta m = (J_x A - J_{x+\Delta x} A) \Delta t \quad (3)$$

令 Δx 和 Δt 均 $\rightarrow 0$ ，则有：

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\frac{\partial J}{\partial x} \quad (4)$$

此方程称为连续性方程，将式 (2) 代入式 (4)，得：

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right) \quad (5)$$

这就是 Fick 第二定律的表达式，亦称扩散第二方程。

如果扩散系数 D 与浓度无关, 则式 (5) 可以简化为:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (6)$$

对于三维扩散问题, 菲克第二定律应表示为:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial c}{\partial z} \right) \quad (7)$$

浓度梯度呈球形对称, 且 D 为常量时, 式 (7) 可简化为:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 c}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial c}{\partial r} \right) \quad (8)$$

Fick 第二定律表达了扩散元素浓度与时间及位置间的一般关系。根据初始条件和边界条件处理具体问题, 便可获得相应的解。

5.1.3 热传导

导热是物体的各部分之间不发生相对位移, 依靠分子、原子和自由电子等微观粒子的热运动所产生的热传递过程。

在研究水滴蒸发的实际应用中, 因为温差而引起的能量转移为传热; 任何情况下, 只要在某介质中或是两个介质之间存在温差, 便会发生热量从高温向低温的传递过程, 这个过程称为热传导, 也叫热扩散。Fourier 定律就是描述热传导的基本定律。热传导率描述的是材料导热能力的属性, 材料不同热传导率也就不同, 其值大小受温度影响很大。但是本文中由于高温热源与低温热源之间的温差不是很大故而认定其热传导系数, 密度, 比热容以及厚度均不变。[3]

5.1.4 热传导方程的推导

设有一根截面积为 A 的均匀细杆, 沿杆长有温度变化, 其侧面绝热, 考虑其热量的传播过程。

由于杆是均匀且细的, 所以任何时刻可以将杆的横截面上温度视为相同; 由于杆侧面绝热, 因此热量只沿杆长方向传导, 所以这是一个一维的热传导问题。

如图 5.2 所示, 取杆中心骨架与 x 轴重合, 以 $u(x, t)$ 表示杆上 x 点处 t 时刻的温度。从杆内部划出一小段 Δx , 考察这一小段, 在时间间隔 Δt 内热量流动情况。

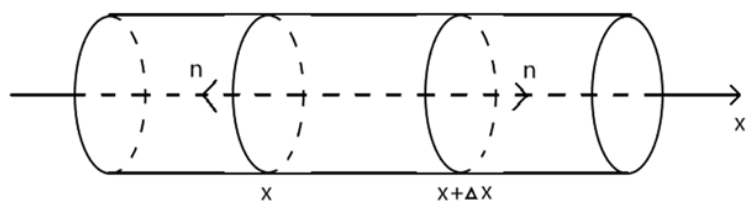


图 5 细杆模型

设 c 为杆的比热容（单位物质升高或降低单位温度所吸收或放出的热量，它与物质的材料有关）， ρ 为杆的密度，则有：

（1）在 Δt 时间内引起小段 Δx 温度升高，所需热量为：

$$Q = c(\rho A \Delta x)[u(x, t + \Delta t) - u(x, t)]$$

故当 $\Delta t \rightarrow 0$ 时：

$$Q \approx c\rho A u_t \Delta x \Delta t$$

而 Fourier 实验定律告诉我们：当介质内有温差存在时，热量由温度高处向温度低处流动，单位时间流过单位面积的热量 q （热流密度）与温度下降率成正比：

$$q = -k \frac{\partial u}{\partial n}$$

其中， k 为导热率（与介质材料有关，严格来说也与温度有关，在温度变化范围不大时可忽略）； $\frac{\partial u}{\partial n}$ 的方向是通过曲面的外法向量方向；而负号表示由温度高处流向温度低处。因此：

（2）在 Δt 时间内沿 x 轴正向流入 x 处截面的热量为：

$$Q_1(x) = -k u_x(x, t) A \Delta t$$

（3）在 Δt 时间内由 $x + \Delta x$ 处截面流出的热量为：

$$Q_2(x + \Delta x) = -k u_x(x + \Delta x, t) A \Delta t$$

根据能量守恒定律，流入 Δx 段总热量与 Δx 段中热源产生的热量应正好是 Δx 段温度升高所吸收的热量，即：

$$Q = Q_1 - Q_2$$

因此有：

$$c\rho A u_t \Delta x \Delta t = -k u_x(x, t) A \Delta t + k u_x(x + \Delta x, t) A \Delta t$$

即：

$$c\rho u_t = \frac{k[u_s(x + \Delta x, t) - u_s(x, t)]}{\Delta x}$$

令 $\Delta x \rightarrow 0$ 两边取极限：

$$u_t = \frac{k}{c\rho} u_{xx}$$

$$u_t = Du_{xx}$$

即：

$$u_t = Du_{xx}, D = \frac{k}{c\rho}$$

此式即为一维的热传导方程。

5.2 问题一模型的建立与求解

5.2.1 水滴接触角和水滴蒸发模式的确定

水滴接触角 θ 主要有三种类型。第一种，接触角小于 90 度的亲水性水滴。这种水滴能够迅速地渗透到各种表面上，如玻璃、金属、陶瓷等；第二种，接触角等于 90 度的中性水滴。这种水滴不会扩散或渗透，而是停留在表面上。第三种，接触角大于 90 度的疏水性水滴。这种水滴会在表面上形成球状，不易被吸附或渗透。常见的疏水性材料有塑料、橡胶、蜡等。本题为玻璃容器，所以水滴接触角取 30°。

受接触平面粗糙程度影响，水滴的接触角不同，水滴的蒸发过程也不一样，一般分为三种模式。第一种，恒定接触角蒸发模式（CCA）。这种模式下，液滴接触角不变，接触半径逐渐减小至 0；第二种，恒定接触半径蒸发模式（CCR）。在这种模式下，液滴接触半径不变，接触角将逐渐减小到 0；第三种，“黏-滑”蒸发模式（SS）。在该种模式下，液滴首先以 CCR 模式蒸发，直至接触角达到某一临界值，之后再以 CCA 模式蒸发，直至蒸发完毕。

而在 1994 年，Birdi 等科学家对水在玻璃及特氟龙基底上的蒸发的探究中又得到了如下结论：当接触角小于 90° 时（水-玻璃），液滴以 CCR 模式蒸发，液滴质量与时间成线性关系；当接触角大于 90° 时（水-特氟龙），液滴以 CCA 模式蒸发，液滴质量与时间成非线性关系。除此之外，近些年来不同学者也对不同的蒸发模型进行过实验探究，但并没有在结论上达成一致，诸多不确定因素使得通过实验得到确切一致的蒸发率表达式变得十分困难。[2]

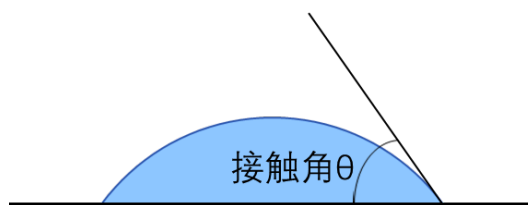


图 6 水滴接触角模型

因此我们建模采用的假设条件为第二种蒸发模式，即当接触角小于 90° 时（水-玻璃），水滴以 CCR 模式进行蒸发。

5.2.2 水滴蒸发过程的确定

在大气压强为 1 个标准大气压时， 20°C 的水的饱和蒸汽压约为 $P_1=2.338\text{kPa}$ 。

根据 Maxwell 从理论分析上提出的水滴蒸发的纯扩散模型，水滴蒸发被当做一个纯蒸汽扩散（diffusion only）过程。这是因为在水滴的蒸发过程中，气液界面上的水分子来不及向外扩散，气液界面会瞬间达到饱和，即在水滴表面形成了一层薄薄的饱和空气层。而在水分子向外扩散的时，气液界面可以看作是不断经历上述过程。因此整个蒸发过程中，气液界面看作是饱和的，空气中的水分子浓度变化可以看作是这层气液界面上的水分子向外扩散而产生的。

5.2.3 边界条件的弱化处理

接下来我们将定性分析水分子的扩散情况。

根据发散场的线性叠加原理，利用水滴的对称性，将平面上的水滴等效为上下两个对称水滴的拼接，以此来弱化边界条件。证明如下：

如下图，为了简化模型的计算，我们考虑将一个与水滴沿底面对称的球冠与原来的单边球冠进行对比分析，假定上下两个球冠表面的水分子摩尔量都是 n_1 。

先考虑上球冠，设 n_1 扩散到平面 L 上得到 L 上的水分子分布为 n_{10} ，现在我们把 n_1 和 n_{10} 看成两个新的“发散源”，因为我们并没有对这个物理场做任何实际的变动，所以它们与只以 n_1 为发散源的情况等效。由于上空间向下空间的水分子扩散始终要经过平面 L ，所以下空间的水分子分布 n_{12} 可以看作是经由 n_{10} 扩散而来，而上半空间的水分子分布可以看作是由 n_1 和 n_{10} 扩散所得的水分子分布 n_{13} 和 n_{11} 的叠加。

同理，对于下球冠，设 n_2 扩散到平面 L 上得到 L 上的水分子分布为 n_{20} ，把 n_2 和 n_{20} 看成新的“发散源”。得到上空间的水分子分布 n_{21} 可以看作是经由 n_{20} 扩散而来。

根据对称性，显然有：

- (1) 分布 n_{11} 与 n_{12} 呈对称分布。
- (2) 分布 n_{12} 与 n_{21} 呈对称分布。
- (3) 分布 n_{10} 与分布 n_{20} 相同。

因此分布 n_{11} 等价于分布 n_{21} 。

上空间总的水分子分布情况满足：

$$n_{up0} = n_{13} + n_{11} + n_{21} = n_{13} + 2n_{11}$$

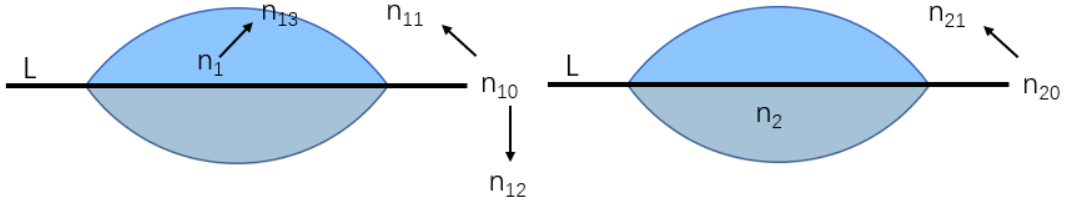


图 7 对称球冠模型

再考虑水滴蒸发的真实情况：

同理设 n_1 扩散到平面 L 上得到 L 上的水分子分布为 n_{10} ，现在我们把 n_1 和 n_{10} 看成两个新的“发散源”，根据假设 2，将水分子与容器表面的碰撞近似为弹性碰撞，所以原本从 n_{10} 向下发散形成的 n_{12} 受 L 反弹，形成新的分布 n'_{12} ，显然有 n_{12} 和 n'_{12} 关于 L 对称。

根据上面的结论，我们得到分布 n_{11} 与分布 n'_{12} 相同。

所以上空间总的水分子分布情况满足：

$$n_{up1} = n_{13} + n_{11} + n'_{12} = n_{13} + 2n_{11} = n_{up0}$$

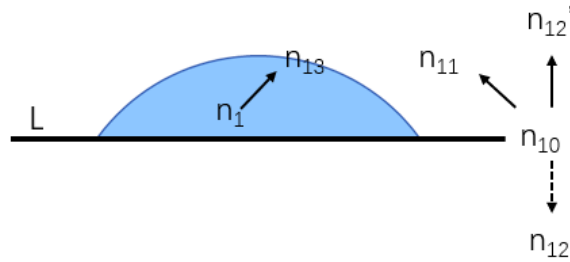


图 8 单边球冠模型

因此，我们可以使用上下两个球冠的发散模型来替代水滴原本的发散模型，从而简化边界条件的设置。根据假设 8，水滴的蒸发过程为恒定接触半径蒸发模式（CCR），因此模型的雏形为：两个上下对称的球冠在不断向外发散水分子，与此同时，球冠的底面半径保持不变，体积在不断减小的过程。

5.2.4 环境水蒸气浓度初值的确定

下面进行定量分析。

查表 (附录 E) 得，20℃ 时，饱和蒸汽压为 $P_0 = 2.3346 \times 10^3 \text{Pa}$ 。

根据假设 7 带入理想气体状态方程 (1)，得到浓度：

$$c_0 = 0.95783 \text{mol/m}^3$$

又根据假设 1，相对湿度通常取 $RH=50\%$ ，因此环境水蒸气浓度初值为：

$$c_1 = RH * c_0 = 0.47892\text{mol/m}^3$$

5.2.5 扩散系数的计算

表 (附录 E) 中给出了 25°C 时的扩散系数为：

$$D_{25} = 2.55 * 10^{-5}\text{m}^2/\text{s}$$

又因为扩散系数的计算公式如下：

$$D = \frac{435.7T^{3/2}}{p(V_A^{1/3} + V_B^{1/3})^2} \sqrt{\frac{1}{\mu_A} + \frac{1}{\mu_B}} \text{ cm}^2/\text{s}$$

根据公式，常温常压下 $D \propto T^{3/2}$ ，因此可以解得 20°C 时扩散系数为：

$$D = 2.486 * 10^{-5}\text{m}^2/\text{s}$$

5.2.6 矩体物理场的构造

把 $10\text{cm} * 10\text{cm} * 20\text{cm}$ 的空间（对称模型）分为 $1000 * 1000 * 2000$ 小份，取中间 $1000 * 1000 * 1000$ 的立方体矩阵，矩体的边长为 $d = 1 \times 10^{-3}\text{m}$ ，每个矩体对应一个浓度值 c ，形成三维点阵 $c = A(i, j, k)$ ，其中 (i, j, k) 为对应矩体的中心坐标。

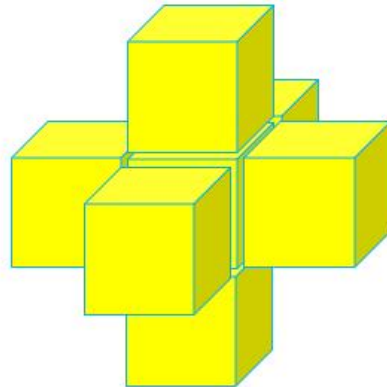


图 9 矩体模型

每个矩体可以看成是一个发散源，且每个矩体的发散只影响相邻的 6 个矩体。根据假设 6，模型不考虑重力对空气分子的影响，可以认为水分子的扩散体系具有各向同性，在理想气体模型下，符合 Fick 定律适用条件，对于 Fick 第二定律：

$$\frac{dc}{dt} = D\nabla^2 c = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}$$

因为相邻矩体中心距离为 d 总的发散情况可视为每个发散源的叠加，所以计算单个发散源发散情况时，无需考虑其它矩体的浓度，可以将其它矩体的浓度视为 0。所以：

$$\frac{\partial c^2}{\partial x^2} = \frac{c^2}{x^2}$$

A 为六个面的面积之和 $A = 6 * d^2$ ，得到发散源的浓度变化为：

$$\Delta c_1 = -\frac{6D\Delta t}{d^2}c_1$$

代入对称性假设，得到接收矩体的浓度变化为：

$$\Delta c_2 = -\frac{D\Delta t}{d^2}c_1$$

边界条件为两个球冠，浓度 = 饱和浓度。并且假定每秒的边界条件保持恒定。

这其实就是有效差分法的另一种推导。

5.2.7 初值的设定

1. 球冠初值

根据假设 5，将水滴接触角 $\theta = 30^\circ$ ，体积 $V = 0.05\text{ml}$ 代入球冠体积公式：

$$V = \frac{\pi h^2}{3}(3r - h)$$

求得底面半径初始值为：

$$r_0 = 6.2438 * 10^{-3}\text{m}$$

亦可求得球的半径和球冠高度分别为：

$$R = 1.24896 * 10^{-2}\text{m}$$

$$h = 1.673 * 10^{-3}\text{m}$$

因此，上球冠球心位置为： $O(51, 51, 51+1000(h-R))$ ，下球冠球心位置为： $O'(51, 51, 51+1000(R-h))$

2. 浓度初值

首先进行位置判定。矩体中心坐标为 $A(i, j, k)$ ，当 $k \geq 51$ 时，以上球冠为判定依据，设 A 到球心 O 的距离为 X ，球半径为 R ，当 $X \leq R$ 时，认为矩体包含在球冠里面，当 $X \geq R$ 时，认为矩体在球冠外面，对于 $k \leq 51$ 的情况，球心取 O' ，限制条件与之前相同。

然后对不同位置的矩体定义浓度。对于包含在球冠内的矩体，浓度视为饱和浓度：

$$c_0 = 0.95783\text{mol/m}^3$$

对于球冠外的矩体，浓度视为环境浓度：

$$c_1 = RH * c_0 = 0.47892 \text{mol/m}^3$$

3. 系数初值

20°C 时扩散系数为 $D = 2.486 * 10^{-5} \text{m}^2/\text{s}$ ，水分子摩尔质量为 $M = 18 * 10^{-3} \text{kg/mol}$ ，矩体边长为 $d = 1 * 10^{-3} \text{m}$ ，时间步长取 $\Delta t = 1 * 10^{-3} \text{s}$ ，密度为 $\rho = 1 * 10^3 \text{kg/m}^3$ ，于是有：

$$\Delta c_1 = -\frac{6D\Delta t}{d^2}c_1 = -0.14916c_1$$

$$\Delta c_2 = \frac{D\Delta t}{Md^2}c_1 = 0.02486c_1$$

$$\Delta V = \Delta n * \frac{M}{\rho} = 1.8 * 10^{-5} \Delta n$$

令边界处浓度始终为 $c_1 = 0.47892 \text{mol/m}^3$

5.2.8 步进过程

第一，将球冠体积 V 和底面半径 r_0 带入公式 $V = \frac{\pi h^2}{3}(3r - h)$ ，解得球冠高度 h ，再将它们代入公式 $R = r^2/h$ ，解得原球半径 R 。

球心 O ， O' 的位置分别为 $O(51, 51, 51 + 1000(h - R))$ ， $O'(51, 51, 51 + 1000(R - h))$ 。

第二，由 5.2.2.1.2 对矩体的位置进行判断，为球冠内的矩体进行浓度赋值：

$$\text{If } X \leq R, C(i, j, k) = c_0$$

第三，设置过程矩阵 $B(i, j, k)$ ，满足如下步进方程：

$$\begin{aligned} B(i, j, k) = & C(i, j, k) - 0.14916C(i, j, k) + 0.02486(C(i - 1, j, k) + C(i + 1, j, k) \\ & + C(i, j - 1, k) + C(i, j + 1, k) + C(i, j, k - 1) + C(i, j, k + 1)) \end{aligned}$$

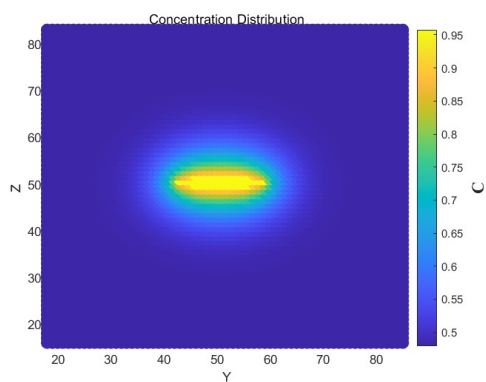
注意：上述方程中 (i, j, k) 不含边界点。

$$\begin{aligned} \Delta V = \Delta n * M / \rho = & \sum \Delta C(i, j, k) * d^3 * M / \rho \\ = & 1.8 * 10^{-14} * \sum \Delta C(i, j, k) \end{aligned}$$

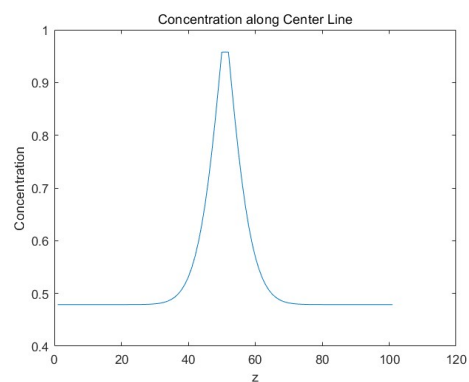
注意：只对球冠内部的部分进行求和，即：对球冠内的浓度变化求和。

第四，数据归还： $C(i, j, k) = 0$ ， $t = t + \Delta t$ ， $V = V + \Delta V$ ， $A(i, j, k) = B(i, j, k)$ 。

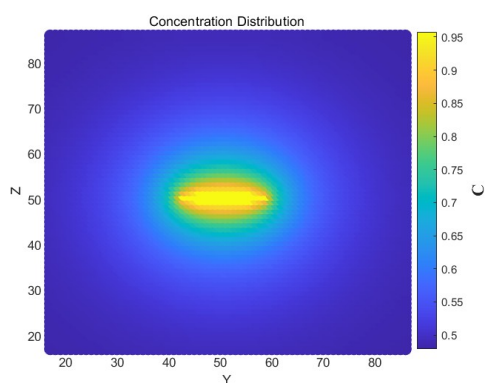
第五，最后选取 $t = 1\text{s}$ ， $t = 10\text{s}$ ， $t = 100\text{s}$ ，导出图像，得到水滴周围空气中的湿度随时间的变化规律如下：（代码附在最后）



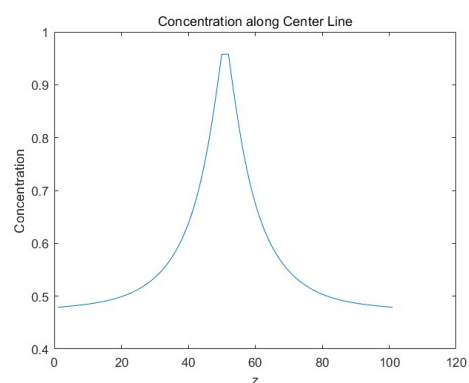
(a) 1s 内的 y-z-c 图



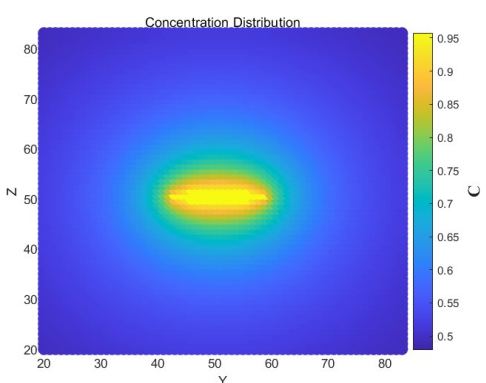
(b) 1s 内的 z-c 图



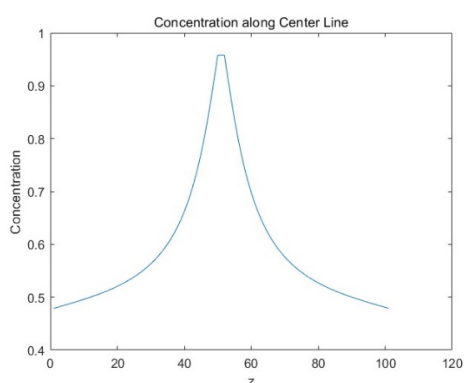
(c) 10s 内的 y-z-c 图



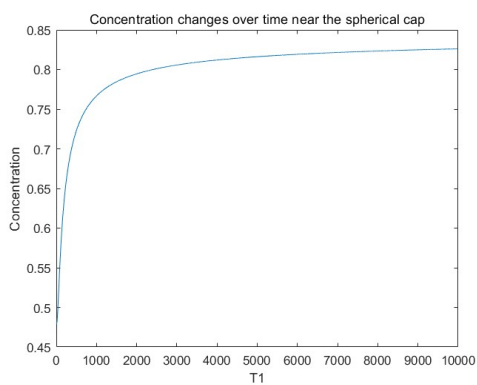
(d) 10s 内的 z-c 图



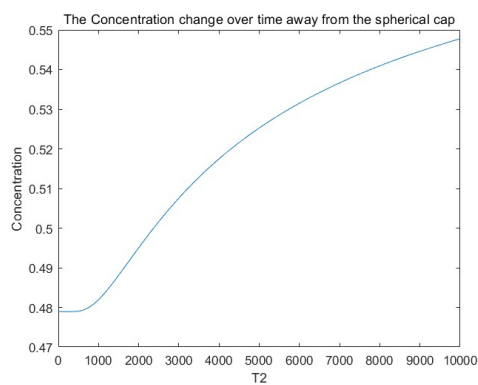
(e) 100s 内的 y-z-c 图



(f) 100s 内的 z-c 图



(a) 靠近球冠的点的 t-c 图



(b) 远离球冠的点的 t-c 图

5.2.9 图像分析

因为浓度乘上水分子摩尔质量就是绝对湿度，所以这里以浓度分布为输出观察结果。我们用 (i, j, k) 来表示在 x - y - z 三维空间中的任意一点。

左上方三张图为 y - z - c 图，通过色彩深浅直观展示了 y - z 空间上的浓度分布，根据对称性，该图像能够直接反映出整个空间上的浓度分布，从图像中可看出：浓度分布的等位线大致为椭球冠状，椭球冠所在椭球的长轴与短轴会随与水滴之间的距离增大而增加，椭球形状越来越圆，离心率也会随之减小。说明随着观察尺度的增大，浓度的变化会逐渐呈现出各向同性。

右上方三张图为 z - c 图，反映了水滴中轴线上的浓度分布。该图像直观的反映出：越靠近水滴，空气中水分子浓度的变化就越大。这是因为浓度的变化本质上是一个由近及远的发散过程。

最下方的两张图分别为靠近水滴处和远离水滴处的 c - t 图。反映出随着时间的增加，浓度变化率越来越小。其原因在于：水滴刚滴入的时候，系统原来的平衡被打破，水滴蒸发使得周围水蒸气浓度上升，随着时间推移，水滴蒸发率，水分子扩散率逐渐趋于稳定，整个系统动态平衡。

此外，通过对比发现靠近水滴处的浓度变化率会更大，这是因为越靠近水滴，浓度受水滴的影响越大。

5.3 问题二模型的建立与求解

5.3.1 建模过程

运用第一问构建的物理场，一共划分为 N 个矩体（散点），那么平均每个散点占用的体积为：

$$V_1 = V_{\text{总}}/N = 0.002/\text{Nm}^3$$

通过空气湿度变化量对体积进行积分，可得到空气中水分子摩尔量的变化，那么空间中水分子总量为：

$$n = \iiint_V c dV = \sum (cV_1)$$

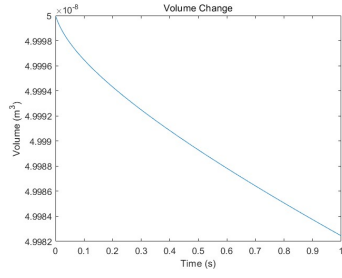
通过求导运算，可得水滴内水分子总量关于时间的导数为：

$$\frac{dn_s}{dt} = -\frac{dn}{dt} = -\sum \frac{dc}{dt} V_1$$

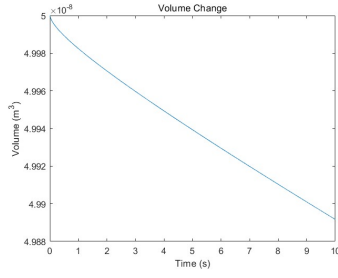
将所得的结果代入水滴的形状—体积—摩尔量模型中，得到水滴体积随时间的变化关系为：

$$\frac{dV}{dt} = \frac{dn_s}{dt} * M/\rho = -3.6 * 10^{-8} \sum \frac{dc}{dt} / N$$

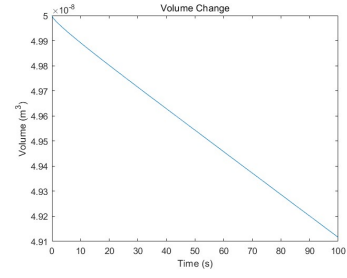
同理，选取 $t = 1\text{s}$, $t = 10\text{s}$, $t = 100\text{s}$ ，导出图像，得到水滴体积随时间的变化规律如下：（代码附在最后）



(a) 1s 内的 t-V 图



(b) 10s 内的 t-V 图



(c) 100s 内的 t-V 图

5.3.2 图像分析

对比三张图，能够得出水滴体积的变化率会随着时间的增大而减小，然后趋于稳定，说明水滴的蒸发效率会由快到慢，而后保持恒定。这同样也是整个蒸发系统从不稳定状态到动态平衡的转变。

由图像（c）可以得出体积与时间大致呈一次关系，且随着蒸发时间越久，越趋于一次函数，斜率 $k' \approx 0.9 \times 10^{-11} \text{m}^3/\text{s}$ 。

5.4 问题三模型的建立与求解

5.4.1 建模过程

水滴在蒸发过程中，主要有以下几种能量的变化：潜热能、表面张力势能、大气压力做功、和空气中水分子的能量变化。所以，我们考虑构建能量守恒关系式。

当水分子从液态转变为气态时，需要吸收热量，因此水滴蒸发时会从周围的环境吸收热量以保持热平衡。由于在常温常压下的小范围内，空气分子势能可忽略，空气分子动能近似为总能量变化 Q_L 。

由水滴表面的能量守恒得到热流密度：

$$q = \frac{dE_k}{Sdt} = -\frac{L * dm}{Sdt}$$

代入傅里叶定律：

$$q = k\nabla T$$

得到：

$$\nabla T = -\left(\frac{Ldm}{Sdt}\right)/k$$

此外，由于热传导方程：

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T$$

和第一问中的 Fick 第二定律表达式类似，因此求解方式如出一辙。

那么我们就可以建立有限差分法模型来求解了。对于边界上每个立方体而言：

$$\Delta m = -\Delta n * M = \Delta c * d^3 * M, S = Pd^2$$

其中， P 为立方体周围在球冠外部的立方体个数。

$$M = 0.018\text{kg/mol}, L = 2.451824 * 10^6\text{J/kg}$$

20°C 时，参数近似为标准大气压下干空气的参数，因此：

$$k = 0.0259\text{W/m} * \text{k}, \alpha = 21.4 * 10^{-6}\text{m}^2/\text{s}$$

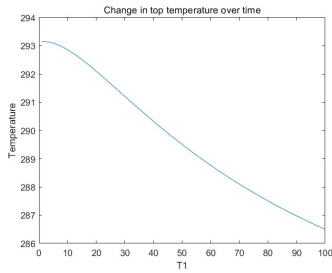
物理场沿用模型一，Neumann 边界条件为：

$$\nabla T = -(\frac{L\Delta m}{S\Delta t})/k$$

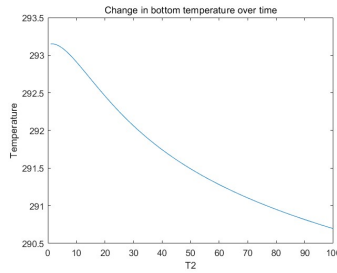
偏微分方程为热传导方程：

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha \nabla^2 T = 21.4 * 10^{-6} \nabla^2 T$$

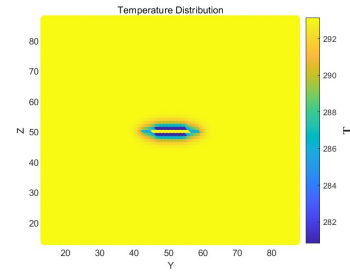
同理，选取 $t = 0.1\text{s}$, $t = 1\text{s}$, $t = 10\text{s}$ ，分别导出三段时间下的球冠顶部 T-t 图、球冠底部 T-t 图、周围环境图像 y-z-T 图，如下：



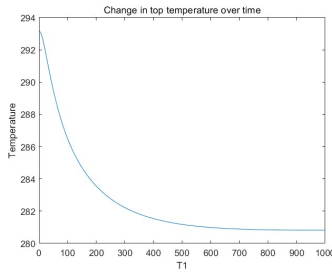
(a) 0.1s 内球冠顶部的 t-T 图



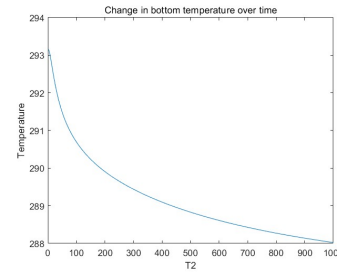
(b) 0.1s 内球冠底部的 t-T 图



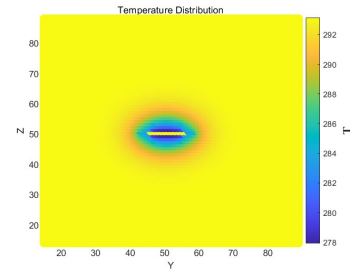
(c) 0.1s 内周围环境的 y-z-T 图



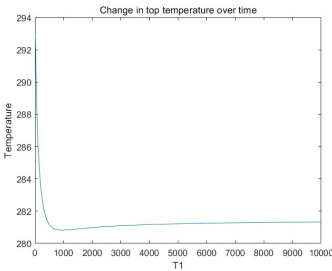
(d) 1s 内球冠顶部的 t-T 图



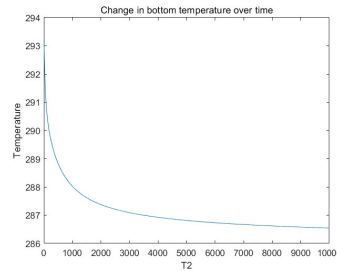
(e) 1s 内球冠底部的 t-T 图



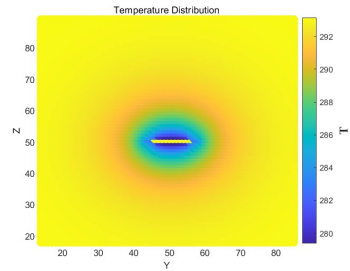
(f) 1s 内周围环境的 y-z-T 图



(g) 10s 内球冠顶部的 t-T 图



(h) 10s 内球冠底部的 t-T 图



(i) 10s 内周围环境的 y-z-T 图

5.4.2 图像分析

类似于对浓度的分析，图像反映出随着时间的增加，温度变化率越来越小，其原因为：随着时间推移，周围空气的热流密度逐渐趋于稳定，整个系统动态平衡。

而在水滴顶端的温度图像中，发现温度在后期会上升，这是因为随着时间推移，水滴的蒸发速度越来越慢，导致吸热变少，温度下降到一定程度后，为了维持动态平衡，温度会随着吸热减少而缓慢升高。

5.5 问题四模型的建立与求解

5.5.1 建模过程

25°C 时，查表（附录 E）得各种参数的值如下：

$$D_{25} = 2.55 * 10^{-5} \text{m}^2/\text{s}$$

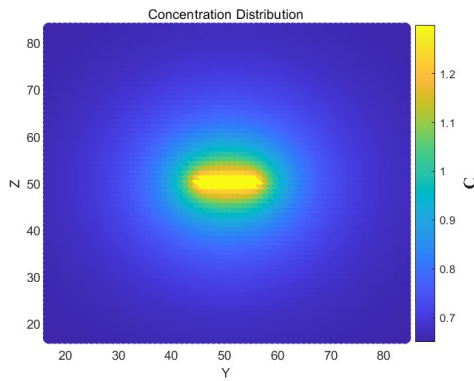
$$\frac{\partial c}{\partial t} = 2.55 * 10^{-5} \nabla^2 c$$

$$L = 2.4396904 * 10^6 \text{J/kg}$$

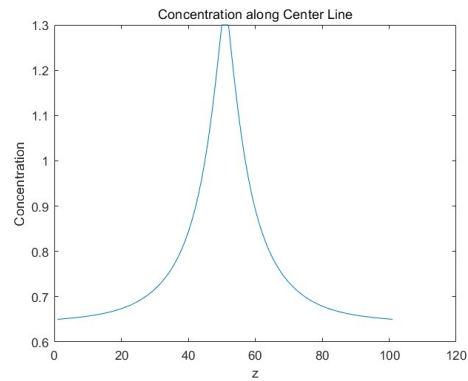
$$k = 0.0263 \text{W/m} \cdot \text{K}$$

$$\alpha = 22.1 * 10^{-6} \text{m}^2/\text{s}$$

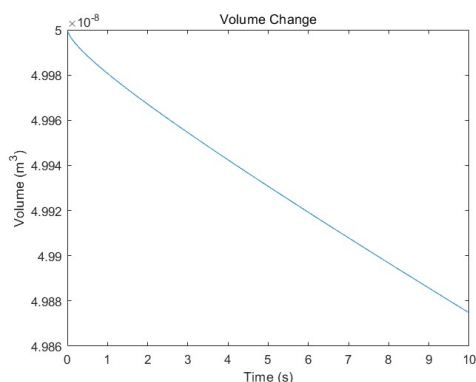
以 10s 变化时间为例，将新的温度条件代入模型重新求解即可得如下图像：



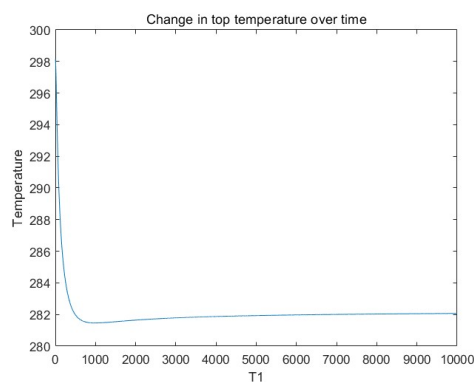
(a) 25°C 时的 y-z 图



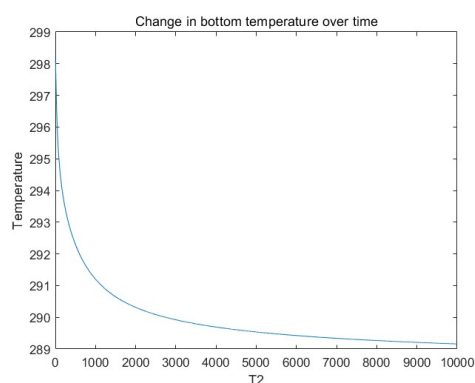
(b) 25°C 时的 z-c 图



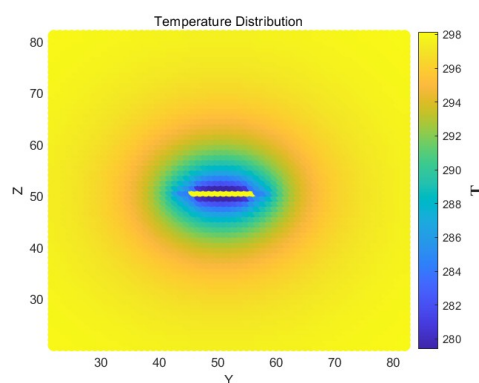
(c) 25°C 时的 t-V 图



(d) 25°C 时球冠顶部的 t-T 图



(e) 25°C 时球冠底部的 t-T 图



(f) 25°C 时周围环境的 y-z-T 图

5.5.2 图像分析

观察发现，与 20°C 相比，25°C 时浓度和温度的变化程度更大，变化速度也更快。即，温度越高，蒸发速率越快，符合实际。

六、模型的评价

6.1 模型的优点

1. 在求解弹性碰撞模型时采用对称分析，提高了建模的普遍适用性和可行性，并有利于简化复杂问题。
2. 运用多种图表描述浓度变化规律，较为直观的体现了浓度温度随时间的变化。
3. 物理场的网格划分和发散源的假定在解决复杂问题时具有直观性，逻辑更为清晰。
4. 四个问题的模型联系紧密，层层递进。

6.2 模型的缺点

1. 水滴体积较小时，其形状受重力影响显著，但我们忽略了这部分变化。

2. 精度低，计算量大，难以将水滴蒸发的全过程求解出来。模型的精度取决于计算机的运行速度和求解时间。模型精度低，难以求解蒸发全过程的原因在于，计算量过大。若能对矩阵进行多线程计算，并且提高计算机的运算效率，就能得到更为精确真实的物理模型。

七、模型的推广

液滴蒸发是伴随喷雾过程中的一种物理现象，本文水滴蒸发模型可以推广应用在基于喷雾的流体动力学，并且在相似背景下的应用众多，如制冷剂等。不同的单个液滴模型参数对会影响喷雾的计算结果，所以本文水滴蒸发模型对喷雾中的单个液滴研究具有重要的意义。

参考文献

- [1] 刘鑫, 张旋, 闵敬春. 壁面静止水滴冻结过程形状变化 [J]. 工程热物理学报, 2020, 41(03): 704-708.
- [2] 王宇. 倾斜面上微小固着水滴的蒸发特性分析 [D]. 上海交通大学, 2021. DOI: 10.27307/d.cnki.gsjtu.2021.000410.
- [3] 赵凯华, 罗蔚茵, 新概念物理教程. 热学 [M]. 第二版. 北京: 高等教育出版社, 2005. 11.
- [4] 秦玉明. 弯曲液面饱和蒸气压的研究 [J]. 大学物理, 2007(02): 13-16. DOI: 10.16854/j.cnki.1000-0712.2007.02.005.
- [5] 童钧耕. 工程热力学 [M]. 北京, 高等教育出版社, 2007: 228-231.
- [6] Leizerson I, Lipson S, Lyushnin A. Wetting properties: when larger drops evaporate faster [J]. Nature, 2003, 422(6930): 395-396.

附录 A (1) 和 (2) 代码

```
clear
syms H;
% 网格数量
N = 101;

% 初始化参数
dt = 0.001; % 时间步长
D = 2.486e-5; % 扩散系数
d = 0.1/(N-1); % 散点距离
r = 6.2438*10^(-3); % 球冠底面半径
% 初始化网格
c = zeros(N, N, N); % 浓度

% 初始条件
c(:) = 0.47892;
c_next = c;
V = 5*10^-8;
% 球冠高度求解式.....
f(H) = pi*(H^2)*(3*r - H)/3 == V & r>H & H>0;
% 时间步数, 这里需要根据所求时间进行更改, 例如一秒钟的蒸发过程, 取t_steps = 1*1000
t_steps = 100000;
% 初始化图形
figure;

h = vpa(solve(f(H),H)); % 求解球冠高度.....
h = double(h);
R = (r^2)/h; % 求解所在球的半径.....

% 初始边界条件
for i = 42:60
    for j = 42:60
        for k = 51:54
            RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-51+1000*(R-h))^2;
            if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                c(i,j,k) = 0.95783; % 上球冠
                c(i,j,102-k) = 0.95783; % 下球冠
            end
        end
    end
end

% 有限差分法
alpha = D * dt / (d^2);
```



```

for t = 1:t_steps
    for x = 2:N-1
        for y = 2:N-1
            for z = 2:N-1
                c_next(x, y, z) = c(x, y, z) + alpha* (c(x+1, y, z) + c(x-1, y, z) ...
                    + c(x, y+1, z) + c(x, y-1, z) + c(x, y, z+1) + c(x, y, z-1)) - alpha * 6*
                    c(x, y, z);
            end
        end
    end
    c = c_next;
    dc = 0;
    % 边界条件
    for i = 42:60
        for j = 42:60
            for k = 51:54
                RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-51+1000*(R-h))^2;
                if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                    c(i,j,k) = 0.95783; % 上球冠
                    c(i,j,102-k) = 0.95783; % 下球冠
                    if k == 51
                        dc = dc + 0.47892 - c_next(i,j,k)/2; %
                            上球冠内新生成的浓度，也就是浓度变化，因为有重复所以得除以二
                    else
                        dc = dc + 0.95783 - c_next(i,j,k);
                    end
                end
            end
        end
    end
    dV = dc * 1.8 * 10^(-14);
    V = V - dV;
    h = vpa(solve(f(H),H)); % 求解球冠高度.....
    h = double(h);
    R = (r^2) / h; % 求解所在球的半径.....
    Vt(t) = V;
end

time = (1:t_steps) * dt;

% 更新图形
C = squeeze(c(51,:,:));
[y_vals, z_vals] = ind2sub([N, N], find(C(:) > 0));
cncentration = C(C > 0);
figure(1);
scatter(y_vals, z_vals, N, cncentration, 'filled');
colorbar;

```

```

ylabel(colorbar, 'C', 'FontSize', 14, 'FontName', 'Times New Roman', 'FontWeight', 'bold')
drawnow; % 实时绘图

figure(2);
plot(time, Vt);
figure(1);
xlabel('Y');
ylabel('Z');
title('Concentration Distribution');

figure(2);
xlabel('Time (s)');
ylabel('Volume (m^3)');
title('Volume Change');
D = squeeze(c(51, 51, :));
figure(3);
plot(D);
xlabel('z');
ylabel('Concentration');
title('Concentration along Center Line');

```

附录 B (3) 代码

```

clear
syms H;
% 网格数量
N = 101;

% 初始化参数
dt = 0.001; % 时间步长
c0 = 0.95783; % 饱和气压浓度
T0 = 293.15; % 初始温度
D = 2.486e-5; % 扩散系数
d = 0.1/(N-1); % 散点距离
r = 6.2438*10^(-3); % 球冠底面半径
a = 22.1810*10^-6; % 热传导系数
L = 2.451824*10^6; % 潜热系数
K = 0.0259; % 热导率
% 初始化网格
c = zeros(N, N, N); % 浓度
T = zeros(N, N, N); % 温度
dC = zeros(N, N, N); % 浓度变化
% 初始条件
V = 5*10^-8;
c(:) = c0/2;

```

```

T(:) = T0;
c_next = c;
T_next = T;

% 球冠高度求解式
f(H) = pi*(H^2)*(3*r - H)/3 == V & r>H & H>0;
h = vpa(solve(f(H),H)); % 求解球冠高度
h = double(h);
R = (r^2)/h; % 求解所在球的半径
S(1) = 2*pi*R*h;

% 步进系数
kc1 = D*dt/d^2;
kc2 = 1 - 6*kc1; % 浓度的步进系数

kT1 = a*dt/d^2;
kT2 = 1 - 6*kT1; % 温度的步进系数
kT3 = 0.018*L/(K); % 傅里叶定律系数
kT = zeros(N, N, N);

Q = ones(N, N, N); % 判断点的位置
for i = 42:60
    for j = 42:60
        for k = 51:54
            RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-51+1000*(R-h))^2;
            if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                Q(i,j,k) = 0; % 在上球冠内
                Q(i,j,102-k) = 0; % 在下球冠内
                c(i,j,k) = c0; % 上球冠
                c(i,j,102-k) = c0; % 下球冠...浓度边界条件
            end
        end
    end
end

P = zeros(N, N, N); % 判断点周围有多少点在球冠外
U = zeros(N, N, N);
for i = 42:60
    for j = 42:60
        for k = 51:53
            RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-52+1000*(R-h))^2;
            if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                u=Q(i+1,j,k)+Q(i-1,j,k)+Q(i,j+1,k)+Q(i,j-1,k)+Q(i,j,k+1)+Q(i,j,k-1);
                U(i,j,k)=6-u;
                U(i,j,102-k) = U(i,j,k);
                if u==0
                    else

```

```

        P(i,j,k) = 1/u; % 上球冠
        P(i,j,102-k) = P(i,j,k); % 下球冠
    end
end
end
end
end

% 时间步数，这里需要根据所求时间进行更改，例如一秒钟的蒸发过程，取t_steps = 1*1000
t_steps = 10000; %dt=0.001

% 有限差分法
for t = 1:t_steps
    for x = 2:N-1
        for y = 2:N-1
            for z = 2:N-1
                c_next(x, y, z) = kc2*c(x, y, z) + ... %浓度的求解
                kc1*( c(x+1, y, z)+c(x-1, y, z)+c(x, y+1, z)+c(x, y-1, z)+c(x, y, z+1)+c(x, y, z-1) );
                T_next(x, y, z) = (kT2+(1-Q(x,y,z))*kT1*U(x,y,z))*T(x, y, z) + ... %温度的求解
                Q(x,y,z)*kT1*( T(x+1, y, z)+T(x-1, y, z)+T(x, y+1, z)+T(x, y-1, z)+T(x, y, z+1)+T(x, y, z-1)
                )+...
                (1-Q(x,y,z))*kT1*( Q(x+1,y,z)*T(x+1, y, z)+Q(x-1,y,z)*T(x-1, y, z)+Q(x,y+1,z)*T(x, y+1,
                z)+Q(x,y-1,z)*T(x, y-1, z)+Q(x,y,z+1)*T(x, y, z+1)+Q(x,y,z-1)*T(x, y, z-1) )+...
                ( a*(-kT3*dC(x,y,z)*P(x,y,z)) );
            end
        end
    end
    c = c_next;
    T = T_next;
    dc = 0;

    % 浓度边界条件
for i = 42:60
    for j = 42:60
        for k = 51:53
            RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-51+1000*(R-h))^2;
            if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                c(i,j,k) = c0; % 上球冠浓度
                c(i,j,102-k) = c0; % 下球冠浓度
                dC(i,j,k) = c0 - c_next(i,j,k);
                dC(i,j,102-k) = dC(i,j,k);
                if k == 51
                    dc = dc + c0/2 - c_next(i,j,k)/2; %
                    上球冠内新生成的浓度，也就是浓度变化，因为有重复所以除以二
                end
            end
        end
    end
end

```

```

        else
            dc = dc + c0 - c_next(i,j,k);
        end
    end
end
end
end

% 回代过程
T1(t) = T(51,51,53); %水滴顶端的温度
T2(t) = T(51,60,51); %水滴底端的温度
dV = dc*1.8*10(-14);
V = V-dV;
h = vpa(solve(f(H),H)); % 求解球冠高度
h = double(h);
R = (r^2)/h; % 求解所在球的半径
Vt(t) = V;
S(t) = 2*pi*R*h;
kT = -kT3*dC.*P; % 傅里叶系数

end

% 初始化图形
figure;

figure(1); %顶端温度图
plot(T1);
xlabel('T1')
ylabel('Temperature')
title('Change in top temperature over time');

figure(2); % 底端温度图
plot(T2);
xlabel('T2')
ylabel('Temperature')
title('Change in bottom temperature over time');

figure(3); %温度彩色图
E=squeeze(T(51,:,:));
[y_vals, z_vals] = ind2sub([ N, N], find(E(:)));
colors = E(E > -100);
scatter(y_vals, z_vals, N, colors, 'filled');
colorbar;
xlabel('Y')
ylabel('Z')

```

```
ylabel(colorbar,'T','FontSize',14,'FontName','Times New Roman','FontWeight','bold')
title('Temperature Distribution')
```

附录 C (4) 代码前两问 (25°C)

```
clear
syms H;
% 网格数量
N = 101;

% 初始化参数
dt = 0.001; % 时间步长
c0 = 1.29992; % 饱和气压浓度
T0 = 298.15; % 初始温度
D = 2.55e-5; % 扩散系数
d = 0.1/(N-1); % 散点距离
r = 6.2438*10^(-3); % 球冠底面半径
a = 22.1810*10^-6; % 热传导系数
L = 2.4396904*10^6; % 潜热系数
K = 0.0263; % 热导率
% 初始化网格
c = zeros(N, N, N); % 浓度
T = zeros(N, N, N); % 温度
dC = zeros(N, N, N); % 浓度变化
% 初始条件
V = 5*10^-8;
c(:) = c0/2;
T(:) = T0;
c_next = c;
T_next = T;

% 球冠高度求解式
f(H) = pi*(H^2)*(3*r - H)/3 == V & r>H & H>0;
h = vpa(solve(f(H),H)); % 求解球冠高度
h = double(h);
R = (r^2)/h; % 求解所在球的半径
S(1) = 2*pi*R*h;

% 步进系数
kc1 = D*dt/d^2;
kc2 = 1 - 6*kc1; % 浓度的步进系数

for i = 45:57
    for j = 45:57
        for k = 51:53
```

```

        RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-51+1000*(R-h))^2;
        if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
            c(i,j,k) = c0; % 上球冠
            c(i,j,102-k) = c0; % 下球冠浓度边界条件
        end
    end
end
end

% 时间步数，这里需要根据所求时间进行更改，例如一秒钟的蒸发过程，取t_steps =0.001*1000
t_steps = 10000;

% 有限差分法
for t = 1:t_steps
    for x = 2:N-1
        for y = 2:N-1
            for z = 2:N-1
                c_next(x, y, z) = kc2*c(x, y, z) + ... %浓度的求解
kc1*( c(x+1, y, z)+c(x-1, y, z)+c(x, y+1, z)+c(x, y-1, z)+c(x, y, z+1)+c(x, y, z-1) );
            end
        end
    end
    c = c_next;
    T = T_next;
    dc = 0;

    % 浓度边界条件
    for i = 45:57
        for j = 45:57
            for k = 51:53
                RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-51+1000*(R-h))^2;
                if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                    c(i,j,k) = c0; % 上球冠浓度
                    c(i,j,102-k) = c0; % 下球冠浓度
                    dC(i,j,k) = c0 - c_next(i,j,k);
                    dC(i,j,102-k) = dC(i,j,k);
                    if k == 51
                        dc = dc + c0/2 - c_next(i,j,k)/2; %
                        上球冠内新生成的浓度，也就是浓度变化，因为有重复所以除以二
                    else
                        dc = dc + c0 - c_next(i,j,k);
                    end
                end
            end
        end
    end
end
end
end

```

```

% 回代过程
dV = dc*1.8*10^(-14);
V = V-dV;
h = vpa(solve(f(H),H)); % 求解球冠高度
h = double(h);
R = (r^2)/h; % 求解所在球的半径
Vt(t) = V;
end

time = (1:t_steps) * dt;

% 更新图形
C = squeeze(c(51, :, :));
[y_vals, z_vals] = ind2sub([N, N], find(C(:) > 0));
cncentration = C(C > 0);
figure(1);
scatter(y_vals, z_vals, N, cncentration, 'filled');
colorbar;
ylabel(colorbar, 'C', 'FontSize', 14, 'FontName', 'Times New Roman', 'FontWeight', 'bold')
drawnow; % 实时绘图

figure(2);
plot(time, Vt);
figure(1);
xlabel('Y');
ylabel('Z');
title('Concentration Distribution');

figure(2);
xlabel('Time (s)');
ylabel('Volume (m^3)');
title('Volume Change');
D = squeeze(c(51, 51, :));
figure(3);
plot(D);
xlabel('z');
ylabel('Concentration');
title('Concentration along Center Line');

```

附录 D (4) 代码第三问 (25°C)

```

clear
syms H;
% 网格数量

```



```

N = 101;

% 初始化参数
dt = 0.001; % 时间步长
c0 = 1.29992; % 饱和气压浓度
T0 = 298.15; % 初始温度
D = 2.55e-5; % 扩散系数
d = 0.1/(N-1); % 散点距离
r = 6.2438*10^(-3); % 球冠底面半径
a = 22.1810*10^-6; % 热传导系数
L = 2.4396904*10^6; % 潜热系数
K = 0.0263; % 热导率

% 初始化网格
c = zeros(N, N, N); % 浓度
T = zeros(N, N, N); % 温度
dC = zeros(N, N, N); % 浓度变化

% 初始条件
V = 5*10^-8;
c(:) = c0/2;
T(:) = T0;
c_next = c;
T_next = T;

% 球冠高度求解式
f(H) = pi*(H^2)*(3*r - H)/3 == V & r>H & H>0;
h = vpa(solve(f(H),H)); % 求解球冠高度
h = double(h);
R = (r^2)/h; % 求解所在球的半径
S(1) = 2*pi*R*h;

% 步进系数
kc1 = D*dt/d^2;
kc2 = 1 - 6*kc1; % 浓度的步进系数

kT1 = a*dt/d^2;
kT2 = 1 - 6*kT1; % 温度的步进系数
kT3 = 0.018*L/(K); % 傅里叶定律系数
kT = zeros(N, N, N);

Q = ones(N, N, N); % 判断点的位置
for i = 42:60
    for j = 42:60
        for k = 51:54
            RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-51+1000*(R-h))^2;
            if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                Q(i,j,k) = 0; % 在上球冠内
                Q(i,j,102-k) = 0; % 在下球冠内
            end
        end
    end
end

```

```

        c(i,j,k) = c0; % 上球冠
        c(i,j,102-k) = c0; % 下球冠...浓度边界条件
    end
end
end
end

P = zeros(N, N, N); %判断点周围有多少点在球冠外
U = zeros(N, N, N);
for i = 42:60
    for j = 42:60
        for k = 51:53
            RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-52+1000*(R-h))^2;
            if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                u=Q(i+1,j,k)+Q(i-1,j,k)+Q(i,j+1,k)+Q(i,j-1,k)+Q(i,j,k+1)+Q(i,j,k-1);
                U(i,j,k)=6-u;
                U(i,j,102-k) = U(i,j,k);
                if u==0
                    else
                        P(i,j,k) = 1/u; % 上球冠
                        P(i,j,102-k) = P(i,j,k); % 下球冠
                    end
                end
            end
        end
    end
end

% 时间步数，这里需要根据所求时间进行更改，例如一秒钟的蒸发过程，取t_steps = 1*1000
t_steps = 10000; %dt=0.001

% 有限差分法
for t = 1:t_steps
    for x = 2:N-1
        for y = 2:N-1
            for z = 2:N-1
                c_next(x, y, z) = kc2*c(x, y, z) + ... %浓度的求解
kc1*( c(x+1, y, z)+c(x-1, y, z)+c(x, y+1, z)+c(x, y-1, z)+c(x, y, z+1)+c(x, y, z-1) );
                T_next(x, y, z) = (kT2+(1-Q(x,y,z))*kT1*U(x,y,z))*T(x, y, z) + ... %温度的求解
Q(x,y,z)*kT1*( T(x+1, y, z)+T(x-1, y, z)+T(x, y+1, z)+T(x, y-1, z)+T(x, y, z+1)+T(x, y, z-1)
                )+...
(1-Q(x,y,z))*kT1*( Q(x+1,y,z)*T(x+1, y, z)+Q(x-1,y,z)*T(x-1, y, z)+Q(x,y+1,z)*T(x, y+1,
                z)+Q(x,y-1,z)*T(x, y-1, z)+Q(x,y,z+1)*T(x, y, z+1)+Q(x,y,z-1)*T(x, y, z-1) )+...
( a*(-kT3*dC(x,y,z)*P(x,y,z)));
            end
        end
    end
end

```

```

        end
    end
    c = c_next;
    T = T_next;
    dc = 0;

    % 浓度边界条件
for i = 42:60
    for j = 42:60
        for k = 51:53
            RR = (i-51)^2 + (j-51)^2 + (k-51+1000*(R-h))^2;
            if RR < (1000*R)^2 % 判断点与球冠的位置关系
                c(i,j,k) = c0; % 上球冠浓度
                c(i,j,102-k) = c0; % 下球冠浓度
                dC(i,j,k) = c0 - c_next(i,j,k);
                dC(i,j,102-k) = dC(i,j,k);
                if k == 51
                    dc = dc + c0/2 - c_next(i,j,k)/2; %
                        上球冠内新生成的浓度，也就是浓度变化，因为有重复所以除以二
                else
                    dc = dc + c0 - c_next(i,j,k);
                end
            end
        end
    end
end

% 回代过程
T1(t) = T(51,51,53); %水滴顶端的温度
T2(t) = T(51,60,51); %水滴底端的温度
dV = dc*1.8*10^(-14);
V = V-dV;
h = vpa(solve(f(H),H)); % 求解球冠高度
h = double(h);
R = (r^2)/h; % 求解所在球的半径
Vt(t) = V;
S(t) = 2*pi*R*h;
kT = -kT3*dC.*P; % 傅里叶系数

end

% 初始化图形
figure;

figure(1); %顶端温度图
plot(T1);

```

```

xlabel('T1')
ylabel('Temperature')
title('Change in top temperature over time');

figure(2); % 底端温度图
plot(T2);
xlabel('T2')
ylabel('Temperature')
title('Change in bottom temperature over time');

figure(3); %温度彩色图
E=squeeze(T(51,:,:));
[y_vals, z_vals] = ind2sub([ N, N], find(E(:)));
colors = E(E > -100);
scatter(y_vals, z_vals, N, colors, 'filled');
colorbar;
xlabel('Y')
ylabel('Z')
ylabel(colorbar, 'T', 'FontSize', 14, 'FontName', 'Times New Roman', 'FontWeight', 'bold')
title('Temperature Distribution')

```

附录 E 表格数据

温 度 (℃)	绝对压强		蒸汽的 密度 (kg/m 3)	焓				汽化热	
	(kgf/cm 2)	(kPa)		液体		蒸汽		(kcal/kg)	(kJ/kg)
				(kcal/kg)	(kJ/kg)	(kcal/kg)	(kJ/kg)		
0	0.0062	0.6082	0.00484	0	0	595	2491.1	595	2491.1
5	0.0089	0.8731	0.00680	5.0	20.94	597.3	2500.8	592.3	2479.86
10	0.0125	1.2262	0.00940	10.0	41.87	599.6	2510.4	598.6	2468.53
15	0.0174	1.7068	0.01283	15.0	62.80	602.0	2520.5	587.0	2457.7
20	0.0238	2.3346	0.01719	20.0	83.74	604.3	2530.1	584.3	2446.3
25	0.0323	3.1684	0.02304	25.0	104.67	606.6	2539.7	581.6	2435.0
30	0.0433	4.2474	0.03036	30.0	125.60	608.9	2549.3	578.9	2423.7
35	0.0573	5.6207	0.03960	35.0	146.54	611.2	2559.0	576.2	2412.4

(a) 水的饱和和蒸汽压表

气体在空气中的 D , 25°C , $p=1\text{atm}$

氨-空气	2.81×10^{-5}	苯蒸气-空气	0.84×10^{-5}
水蒸气-空气	2.55×10^{-5}	甲苯蒸气-空气	0.88×10^{-5}
CO_2 -空气	1.64×10^{-5}	乙醚蒸气-空气	0.93×10^{-5}
O_2 -空气	2.05×10^{-5}	甲醇蒸气-空气	1.59×10^{-5}
H_2 -空气	4.11×10^{-5}	乙醇蒸气-空气	1.19×10^{-5}

液相, 20°C , 稀溶液

氨-水	1.75×10^{-9}	氯化氢-水	2.58×10^{-9}
CO_2 -水	1.78×10^{-9}	氯化钠-水	2.58×10^{-9}
O_2 -水	1.81×10^{-9}	乙烯醇-水	0.97×10^{-9}
H_2 -水	5.19×10^{-9}	CO_2 -乙烯醇	3.42×10^{-9}

(b) 扩散系数表

水温 ($^{\circ}\text{C}$)	蒸发潜热 r (Kcal/kg)	饱和蒸汽 压 P_s (mmHg)	水温 ($^{\circ}\text{C}$)	蒸发潜热 r (Kcal/kg)	饱和蒸汽 压 P_s (mmHg)
18	587.1	15.5	25	583.1	23.8
19	586.6	16.5	26	582.5	25.2
20	586.0	17.5	27	581.9	26.7
21	585.4	18.7	28	581.4	28.3
21	584.9	19.8	29	580.8	30.0
23	584.3	21.1	30	580.4	31.8
24	583.6	22.4	-	-	-

(c) 潜热系数表

t $^{\circ}\text{C}$	ρ kg/m^3	C_p $\text{kJ}/(\text{kg}\cdot\text{K})$	$\lambda \times 10^2$ $\text{W}/(\text{m}\cdot\text{K})$	$a \times 10^6$ m^2/s
-50	1.584	1.013	2.04	12.7
-40	1.515	1.013	2.12	13.8
-30	1.453	1.013	2.2	14.9
-20	1.395	1.009	2.28	16.2
-10	1.342	1.009	2.36	17.4
0	1.293	1.005	2.44	18.8
10	1.247	1.005	2.51	20
20	1.205	1.005	2.59	21.4
30	1.165	1.005	2.67	22.9
40	1.128	1.005	2.76	24.3
50	1.093	1.005	2.83	25.7
60	1.06	1.005	2.9	27.2
70	1.029	1.009	2.96	28.6
80	1	1.009	3.05	30.2
90	0.972	1.009	3.13	31.9
100	0.946	1.009	3.21	33.6
120	0.898	1.009	3.34	36.8
140	0.854	1.013	3.49	40.3

(d) 导热系数表