

Кинетический анализ фазовых переходов

Е. Г. Маясов

старший преподаватель, Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского (Арзамасский филиал). Россия, г. Арзамас. E-mail: eugenemay@yandex.ru

Аннотация. С помощью методов математической теории неоднородных газов рассмотрен процесс медленного фазового перехода на границе жидкой и газообразной фаз. Скорость течения пара предполагается много меньше скорости звука. Кинетический анализ проведен на основе решения линеаризованного уравнения Больцмана с точным интегралом столкновений методом полупространственных моментов для молекул газовой фазы, взаимодействующих как твердые сферы. Рассчитаны коэффициенты скачков концентрации, температуры и коэффициент испарения в формуле Герца – Кнудсена. Научная новизна работы заключается в учете 8 моментов двухпоточной функции распределения молекул пара по скоростям и исследовании зависимости параметров задачи от коэффициента аккомодации энергии при взаимодействии молекул газа с межфазовой поверхностью. Проведено сравнение с результатами других исследований. Косвенно подтверждается сходимости ряда при разложении функции распределения по полиномам Сонина – Лагерра.

Ключевые слова: кинетическое уравнение Больцмана, скачок температуры, скачок концентрации, формула Герца – Кнудсена.

Исследование условий испарения и конденсации имеет очевидную теоретическую и практическую значимость [11; 15]. В связи с этим продолжается изучение граничных условий теплообмена и испарения с учетом различных физических явлений (скачков температуры, концентрации, давления). Обнаружение аномального поведения температуры газовой фазы при испарении (конденсации) на двух параллельных платинах [14] привело к необходимости дальнейших теоретических исследований. Эксперименты различных авторов показали аномально большое значение температурного скачка. В некоторых экспериментах измеренная разность температур не только превышала теоретическое значение, но и имела другой знак. В итоге кинетический анализ стал подвергаться сомнению и предпочтение стало отдаваться *StatisticalRateTheory* (SRT). Обзоры экспериментов, различных теоретических подходов к проблеме см. [1, 2, 9, 10, 16, 17]. Однако нет оснований отвергать кинетическую теорию газов (КТГ) под влиянием указанных экспериментальных данных. Результаты настоящей работы подтверждают данные, полученные на основе КТГ.

Постановка задачи и метод решения. Рассматривается испарение с плоской поверхности жидкой фазы YOZ . Ось X направлена по нормали к поверхности, полупространство $X>0$ занимает собственный насыщенный пар жидкой фазы. Обозначим: T_s – температура поверхности, n_s – соответствующая ей концентрация молекул насыщенной газовой фазы (пара), T_0 – температура, поддерживаемая вдали от поверхности, n_0 и u_x – концентрация молекул и скорость течения пара вдали от поверхности (за пределами слоя Кнудсена). Состояние газа полностью определяется любым из трех макроскопических параметров: u_x , а также скачками температуры и концентрации $\delta_T = (T_s - T_0)/T_0$, $\delta_n = (n_s - n_0)/n_0$. В случае слабого испарения, когда скорость течения пара много меньше средней тепловой скорости молекул (что позволяет линеаризовать задачу), связь между ними линейная:

$$\delta_T = K_T U_x, \delta_n = K_n U_x, U_x = (m_0/2kT_0)^{1/2} u_x \ll 1,$$

где m_0 – масса молекул пара, k – постоянная Больцмана. Цель настоящей работы – вычисление коэффициентов скачков температуры и концентрации K_T и K_n . Движение газа описывается линеаризованным уравнением Больцмана [7; 8].

$$\mathbf{v}\nabla f = J(f),$$

\mathbf{v} – молекулярная скорость, $J(f)$ – больцмановский интеграл столкновений.

Функция распределения молекул по скоростям ищется в виде

$$f(x, \mathbf{c}) = f^{(0)} [1 + 2c_x U_x + \varphi(x, \mathbf{c})],$$

где \mathbf{c} – безразмерная молекулярная скорость, $f^{(0)}$ – равновесный максвеллиан $f^{(0)} = n_0 (m_0/2\pi kT_0)^{3/2} \exp(-c^2)$, $\varphi(x, \mathbf{c})$ – подлежащая определению поправка, учитываю-

щая влияние поверхности жидкости и разрывность функции распределения для падающих на нее и отраженных молекул газа. Кинетическое уравнение принимает вид

$$c_x \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -n_0 I(\varphi) \quad (1)$$

где $I(\varphi)$ – линейризованный оператор столкновений [7]:

$$I[\varphi(\mathbf{c})] = \pi^{-3/2} \int \exp(-c_1^2) [\varphi(\mathbf{c}) + \varphi(\mathbf{c}_1) - \varphi(\mathbf{c}') - \varphi(\mathbf{c}_1')] |\mathbf{c}_1 - \mathbf{c}| b d b d \varepsilon d c_1$$

Решение уравнения (1) ищется в форме разложения по ортогональным полиномам Сонина – Лагерра [7]:

$$\varphi(x, \mathbf{c}) = \mathbf{a}^+(x) \mathbf{s}(\mathbf{c}) + \mathbf{a}^-(x) \mathbf{s}(\mathbf{c}) \text{sign } c_x; \text{sign} - \text{знаковая функция.}$$

$\mathbf{a}^\pm(x) = [a_1^\pm(x), a_2^\pm(x), a_3^\pm(x), a_4^\pm(x)]$ – векторные функции, подлежащие определению;

$$\mathbf{s}(\mathbf{c}) = [1, 3/2 - c^2, c_x, c_x(5/2 - c^2)]^T.$$

Решение уравнения (1) проведено методом полупространственных моментов [12; 13]. После умножения (1) на компоненты векторов $\mathbf{s}(\mathbf{c})$ и $\mathbf{s}(\mathbf{c}) \text{sign } c_x$ и интегрирования в пространстве скоростей получается система моментных дифференциальных уравнений. Моменты оператора столкновений (bracketintegrals) рассчитаны для модели молекул газа, взаимодействующих как твердые сферы. Убывающее на бесконечности решение имеет следующий вид:

$$a_i^\pm = A\alpha_i^\pm \exp(-\alpha x) + B\beta_i^\pm \exp(-\beta x),$$

где $\alpha = 2.31436$, $\beta = 1.39366$.

$$(\alpha_i^+) = [0.5441; -0.1398; -0.4388; -0.001]^T; (\beta_i^+) = [-0.4098; -0.6264; 0.0296; 0.0309]^T;$$

$$(\alpha_i^-) = [0.3409; -0.0961; -0.6053; 0.0016]^T; (\beta_i^-) = [-0.1941; -0.3357; 0.0272; 0.4383]^T.$$

Константы интегрирования A и B определяются из моментных граничных условий на поверхности раздела фаз.

Граничные условия. На поверхности жидкой фазы при $x=0$ функция распределения удовлетворяет модифицированному максвелловскому граничному условию:

$$c_x f^+(0, \mathbf{c}) = c_x q f_s + c_x (1-q) f^-(0, -c_x, c_y, c_z) \quad (2)$$

где q – коэффициент аккомодации энергии; $f_s = n_s (m/2\pi kT_s)^{3/2} \exp(-c^2)$. После умножения соотношения (2) на компоненты вектора $\mathbf{s}(\mathbf{c})$ и интегрирования по полупространству $c_x > 0$ получается система четырех моментных граничных условий, из которых находятся величины A , B , K_n и K_T как константы интегрирования.

Обсуждение результатов. Так как коэффициент аккомодации энергии q близок к единице, полученные громоздкие выражения для скачков температуры и концентрации представлены в форме разложения в ряд с ограничением на члены второго порядка:

$$K_n = \frac{2-q}{q} [1.6958 - 0.12274(1-q) - 0.01881(1-q)^2]$$

$$K_T = \frac{2-q}{q} [0.45053 - 0.00528(1-q) - 0.001627(1-q)^2]$$

В приближении трех моментов, при удерживании полиномов $1, 3/2 - c^2, c_x(5/2 - c^2)$, получены близкие результаты ($q=1$, полная аккомодация):

$$K_n = 1.54668; K_T = 0.447632.$$

Это обстоятельство косвенно свидетельствует о сходимости ряда для функции распределения (строго математически это не доказано).

В монографии [5] на основе аналитического решения модельного БГК – уравнения при полной аккомодации получены значения $K_n = 1.68528$; $K_T = 0.44674$. В статье [4] для БГК – уравнения с частотой столкновений, пропорциональной скорости молекул:

$$K_n = 1.6581; K_T = 0.47374.$$

При описании процессов испарения (конденсации) в технике используется формула Герца – Кнудсена. В обозначениях настоящей работы плотность потока массы пара j

$$j = \gamma \sqrt{\frac{m_0}{2\pi kT_0}} (p_s - p_0). \quad (3)$$

Здесь γ – коэффициент испарения, p_s и p_0 – давления насыщенного пара и пара вдали от границы раздела фаз. Коэффициент испарения с учетом линеаризации может быть выражен через коэффициенты скачков концентрации и температуры:

$$\gamma = \frac{2\sqrt{\pi}}{K_n + K_T}.$$

При $q = 1$ имеем $\gamma = 1.652$.

В работах [3; 6; 14] для модели максвелловских молекул (method of Lees) приведены значения:

$$[14]: \gamma = 1.665; [3]: \gamma = 5/3; [6]: \gamma = \frac{q}{1 - 0.4q}$$

Выводы. Анализ, проведенный в данной работе, подтверждает надежность полученных ранее методами КТГ результатов для различных типов кинетических уравнений и моделей взаимодействия молекул газа. Это обстоятельство имеет большое значение при моделировании процессов испарения и конденсации. Также косвенно подтверждается сходимость ряда по полиномам Сонина – Лагерра для функции распределения молекул газа по скоростям.

Список литературы

1. Герасимов Д. Н., Юрин Е. И. Параметры, определяющие кинетические процессы на поверхности испарения // Теплофизика выс. температур. 2015. Т. 53. № 4. С. 530–537.
2. Крюков А. П., Левашов В. Ю., Павлюкевич Н. В. Коэффициент конденсации: определения современные экспериментальные и расчетные данные, оценка величины // Инженерно-физический журнал. 2014. Т. 87. Вып. 1. С. 229–237.
3. Лабунцов Д. А. Анализ процессов испарения и конденсации // Теплофизика высоких температур. 1967. Т. 5. № 4. С. 647–654.
4. Латышев А. В., Юшканов А. А. Граничные задачи для модельного уравнения Больцмана с частотой, пропорциональной скорости молекул // Известия Академии наук. Механика жидкости и газа. 1996. № 3. С. 140–153.
5. Латышев А. В., Юшканов А. А. Аналитические методы в кинетической теории. М.: МГОУ, 2008. 280 с.
6. Муратова Т. М., Лабунцов Д. А. Кинетический анализ процессов испарения и конденсации // Теплофизика высоких температур. 1969. Т. 7. № 5. С. 959–967.
7. Ферцигер Дж., Капер Г. Математическая теория процессов переноса в газах // пер. с англ. Д. Н. Зубарева и А. Г. Башкирова. М.: Мир, 1976. 554 с.
8. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана / пер. с англ.; под ред. Р. Г. Баранцева. М.: Мир, 1978. 495 с.
9. Bedeaux D., Kjelstrup S., Rubi J. M. Nonequilibrium translational effects in evaporation and condensation // Journal of Chemical Physics. 2003. Vol. 119. No 17. Pp. 9163–9170.
10. Bond M., Struchtrup H. Mean evaporation and condensation coefficients based on energy dependent condensation probability // Physical Review E. 2004. Vol. 70. Is. 6. Pp. 1–21.
11. Frezzotti A., Barbante P. Kinetic theory aspects of non – equilibrium liquid – vapor flows // Mechanical Engineering Reviews. 2017. DOI: 10.1299/mer.16-00540.
12. Gross E. P., Jackson E. A., Ziering S. Boundary value problems in kinetic theory of gases // Ann. Phys. 1957. Vol. 1. No. 2. Pp. 141–167.
13. Gross E. P., Ziering S. Heat flow between parallel plates // Phys. Fluids. 1959. Vol. 2. No. 6. Pp. 701–712.
14. Koffman L. D., Plesset M. S., Lees L. Theory of evaporation and condensation // Physics of Fluids. 1984. Vol. 27. No 4. Pp. 876–880.
15. Persad A. H., Ward Ch. A. Expressions for the Evaporation and Condensation Coefficients in the Hertz – Knudsen Relation // Chemical Reviews. 2016. Vol. 116 (14). Pp. 7727–7767.
16. Rahimi P., Ward Ch. A. Kinetics of Evaporation: Statistical Rate Theory Approach // Int. Journal of Thermodynamics. 2005. Vol. 8. No 1. Pp. 1–14.
17. Sone Y. Kinetic theoretical studies of the half – space problem of evaporation and condensation // Transport theory and Statistical Physics. 2000. Vol. 29(3-5). Pp. 227–260.

Kinetic analysis of phase transitions

E. G. Mayasov

senior lecturer, Nizhny Novgorod State University n. a. N. I. Lobachevsky (Arzamas branch).
Russia, Arzamas. E-mail: eugenemay@yandex.ru

Abstract. Using the methods of the mathematical theory of inhomogeneous gases, the process of a slow phase transition at the boundary of the liquid and gas phases is considered. The speed of steam flow is assumed to be much less than the speed of sound. The kinetic analysis is based on the solution of the linearized Boltzmann equation with an exact collision integral by the method of half-space moments for gas phase molecules interacting as solid spheres. The coefficients of concentration, temperature and evaporation jumps in the Hertz – Knudsen formula are calculated. The scientific novelty of the work consists in taking into account 8 moments of the two-stream function of the distribution of vapor molecules by velocities and studying the dependence of the problem parameters on the energy accommodation coefficient when gas molecules interact with the interphase surface. A comparison with the results of other studies was made. Indirectly, the convergence of the series is confirmed when decomposing the distribution function over Sonin-Laguerre polynomials.

Keywords: Boltzmann kinetic equation, temperature jump, concentration jump, Hertz – Knudsen formula.

References

1. Gerasimov D. N., Yurin E. I. *Parametry, opredelyayushchie kineticheskie processy na poverhnosti ispareniya* [Parameters determining kinetic processes on the evaporation surface] // *Teplofizika vys. temperatur* – Thermophysics of high temperatures 2015. Vol. 53. No. 4. Pp. 530–537.
2. Kryukov A. P., Levashov V. Yu., Pavlyukevich N. V. *Koefficient kondensacii: opredeleniya sovremennye eksperimental'nye i raschetnye dannye, oценка velichiny* [Condensation coefficient: definitions modern experimental and calculated data, estimation of the value] // *Inzhenerno-fizicheskij zhurnal* – Engineering and physical journal. 2014. Vol. 87. Is. 1. Pp. 229–237.
3. Labuncov D. A. *Analiz processov ispareniya i kondensacii* [Analysis of processes of evaporation and condensation] // *Teplofizika vysokih temperatur* – Thermophysics of high temperatures. 1967. Vol. 5. No. 4. Pp. 647–654.
4. Latyshev A. V., Yushkanov A. A. *Granichnye zadachi dlya model'nogo uravneniya Bol'cmana s chastotoj, proporcional'noj skorosti molekul* [Boundary value problems for the model Boltzmann equation with a frequency proportional to the speed of molecules] // *Izvestiya Akademii nauk. Mekhanika zhidkosti i gaza* – Proceedings of the Academy of Sciences. Fluid and gas mechanics, 1996. No. 3. Pp. 140–153.
5. Latyshev A. V., Yushkanov A. A. *Analiticheskie metody v kineticheskoy teorii* [Analytical methods in kinetic theory]. M. Moscow State University. 2008. 280 p.
6. Muratova T. M., Labuncov D. A. *Kineticheskij analiz processov ispareniya i kondensacii* [Kinetic analysis of evaporation and condensation processes] // *Teplofizika vysokih temperatur* – Thermophysics of high temperatures, 1969, Vol. 7. No. 5. Pp. 959–967.
7. Ferziger J., Kaper G. *Matematicheskaya teoriya processov perenosa v gazah* [Mathematical theory of transport processes in gases] // transl. from Eng. by D. N. Zubarev and A. G. Bashkirov. M. Mir. 1976. 554 p.
8. Cercignani K. *Teoriya i prilozheniya uravneniya Bol'cmana* [Theory and applications of the Boltzmann equation] / transl. from Eng.; ed. by R. G. Barantsev. M. Mir. 1978. 495 p.
9. Bedeaux D., Kjelstrup S., Rubi J. M. Nonequilibrium translational effects in evaporation and condensation // *Journal of Chemical Physics*. 2003. Vol. 119. No 17. Pp. 9163–9170.
10. Bond M., Struchtrup H. Mean evaporation and condensation coefficients based on energy dependent condensation probability // *Physical Review E*. 2004. Vol. 70. Is. 6. Pp. 1–21.
11. Frezzotti A., Barbante P. Kinetic theory aspects of non – equilibrium liquid – vapor flows // *Mechanical Engineering Reviews*. 2017. DOI: 10.1299/mer.16-00540.
12. Gross E. P., Jackson E. A., Ziering S. Boundary value problems in kinetic theory of gases // *Ann. Phys.* 1957. Vol. 1. No. 2. Pp. 141–167.
13. Gross E. P., Ziering S. Heat flow between parallel plates // *Phys. Fluids*. 1959. Vol. 2. No. 6. Pp. 701–712.
14. Koffman L. D., Plesset M. S., Lees L. Theory of evaporation and condensation // *Physics of Fluids*. 1984. Vol. 27. No. 4. Pp. 876–880.
15. Persad A. H., Ward Ch. A. Expressions for the Evaporation and Condensation Coefficients in the Hertz – Knudsen Relation // *Chemical Reviews*. 2016. Vol. 116 (14). Pp. 7727–7767.
16. Rahimi P., Ward Ch. A. Kinetics of Evaporation: Statistical Rate Theory Approach // *Int. Journal of Thermodynamics*. 2005. Vol. 8. No 1. Pp. 1–14.
17. Sone Y. Kinetic theoretical studies of the half – space problem of evaporation and condensation // *Transport theory and Statistical Physics*. 2000. Vol. 29(3-5). Pp. 227–260.