

УДК 533.72

© 1997 г. И.А. КУЗНЕЦОВА, А.А. ЮШКАНОВ, Ю.И. ЯЛАМОВ

СИЛЬНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ МОЛЕКУЛЯРНОГО ГАЗА

Методом полупространственных моментов решается кинетическая задача о сильной дозвуковой конденсации многоатомного газа на плоской поверхности. Учитывается вклад внутренних степеней свободы в полную теплоемкость газа. Для данного метода определены области существования решения уравнения Больцмана. Получены аналитические выражения для вычисления концентрации газа за кнудсеновским слоем в зависимости от числа Маха и температуры для случаев одно-, двух- и трехатомных газов.

Задача о сильной конденсации газа на плоской поверхности, т.е. когда нормальная к поверхности раздела фаз составляющая среднемаховой скорости порядка звуковой скорости, сводится к исследованию течения в слое Кнудсена в рамках кинетической теории. Внешним по отношению к слою Кнудсена является невязкое течение, описываемое уравнениями Эйлера. Условия на "внешней границе" слоя Кнудсена являются граничными условиями к уравнениям газодинамики. Для получения этих условий и установления связи между параметрами конденсированной и газовой фазы необходимо решение кинетического уравнения в самом кнудсеновском слое.

Исследование течения в кнудсеновском слое в случае интенсивного испарения молекулярных газов проводилось в [1–3].

Известно, что в отличие от испарения процесс конденсации описывается большим числом параметров и в этом смысле является более сложной проблемой, требующей дополнительного исследования [4–7].

Вопрос о сильной конденсации одноатомного газа рассматривался в [6–13]. В [6–8] уравнение Больцмана решалось численными методами, в [9–13] – путем использования различных моментных методов. В [12] определены области существования решения уравнения Больцмана и исследована зависимость допустимых значений параметров конденсации от коэффициента испарения α . В настоящей работе предлагается обобщение моментного метода [12] на случай многоатомного газа. Коэффициент испарения α для простоты полагается равным единице.

Процессы испарения и конденсации многоатомных газов при малых числах Кнудсена исследовались в [13]. В этой работе хотя и не определены граничные значения параметров газа, однако на основании наиболее общих следствий уравнения Больцмана (законов сохранения и Н-теоремы) даны точные оценки погрешности решения, что позволяет оценить степень достоверности результатов, полученных в рамках других подходов.

Для большинства молекулярных газов в широком диапазоне температур вращательные степени свободы можно рассматривать квазиклассически. Это справедливо, когда расстояние между вращательными уровнями энергии $\hbar^2/2I$ (где I – момент инерции молекулы) мало по сравнению с kT . Значения $\hbar^2/2kI$ велики лишь для легких газов (85,4 К для H_2 и 43 К для D_2). Для O_2 и N_2 они равны 2,1 и 2,9 К соответственно, для HCl – 15,2 К и т.д. [14, 15]. Колебательные степени свободы вносят заметный вклад в термодинамические параметры газа при температурах, значительно более

высоких, чем вращательные. Это связано с тем, что интервалы колебательной структуры термов велики по сравнению с интервалами вращательной структуры. Для примера укажем значения $\hbar\omega/k$ (где $\hbar\omega$ – колебательный квант) для некоторых газов: H_2 – 6100 К, N_2 – 3340 К, O_2 – 2230 К, NO – 2960 К, HCl – 4140 К [14].

Таким образом, при условии, когда колебательные степени свободы заморожены, можно квазиклассически рассматривать только вращательные степени свободы. В соответствующем диапазоне температур характерное время обмена энергией между поступательными и вращательными степенями свободы порядка характерного времени поступательной релаксации, т.е. времени установления равновесия по поступательным степеням свободы [14]. В связи с этим внутренние степени свободы можно учесть путем изменения полной теплоемкости газа за счет вклада в нее вращательной составляющей. Влиянием вращательных степеней свободы на динамику столкновений пренебрегаем. Данный подход впервые был предложен Мотт-Смитом [16] при описании структуры ударных волн в молекулярных газах.

1. Будем рассматривать случай установившегося одномерного течения молекулярного газа вдоль оси x , направленной по нормали к поверхности конденсации в сторону газа. Вдали от поверхности за пределами слоя Кнудсена равновесное состояние одноатомного газа описывается максвелловской функцией распределения f_1 (1.1) со средней скоростью набегающего потока \mathbf{u} ($u < 0$) [12], молекулярного газа – функцией распределения f_j (1.2) ($j = 2, 3$ для двух- и трехатомного газов соответственно)

$$f_1(\mathbf{v}) = n \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2kT} \right\} \quad (1.1)$$

$$f_j(\mathbf{v}, \omega) = nh_j \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m(\mathbf{v} - \mathbf{u})^2}{2kT} - \frac{I\omega^2}{2kT} \right\} \quad (1.2)$$

$$h_2 = \frac{I\omega}{kT}, \quad h_3 = \left(\frac{I}{kT} \right)^{3/2} \frac{\omega^2}{\sqrt{2\pi}}$$

Здесь m – масса молекулы, k – постоянная Больцмана, \mathbf{v} – скорость молекул, n и T – соответственно концентрация и температура газа за кнудсеновским слоем, I – момент инерции молекулы, ω – частота вращения ($0 < \omega < \infty$).

Будем считать, что рассеяние молекул, падающих на поверхность конденсации, носит чисто диффузный характер. Тогда, положив коэффициент испарения равным единице, функции распределения молекул, вылетающих с поверхности, для одноатомного и молекулярного газов ($j = 2, 3$) представим в виде

$$f_{S1}^+(\mathbf{v}) = n_S \left(\frac{m}{2\pi kT_S} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m\mathbf{v}^2}{2kT_S} \right\}, \quad v_x > 0 \quad (1.3)$$

$$f_{Sj}^+(\mathbf{v}, \omega) = n_S h_{Sj} \left(\frac{m}{2\pi kT_S} \right)^{3/2} \exp \left\{ -\frac{m\mathbf{v}^2 + I\omega^2}{2kT_S} \right\}, \quad v_x > 0 \quad (1.4)$$

Здесь n_S – концентрация насыщенного пара при температуре поверхности T_S .

Функция распределения в области формирования течения для молекулярного газа ищется в четырехмодальном виде [12]

$$f_j(x, \mathbf{v}, \omega) = a_1^+(x) f_{Sj}^+ + a_2^+(x) f_j^+ + a_1^-(x) f_{Sj}^- + a_2^-(x) f_j^- \quad (1.5)$$

Здесь f_j^+ и f_j^- ($j = 1, 2, 3$) – функции распределения (1.1), (1.2) ($\mathbf{u} \neq 0$), заданные в полупространствах ($v_x > 0$) и ($v_x < 0$) соответственно.

В (1.5) наряду с функцией распределения $f_{sj}^+(v_x > 0)$ введена функция распределения $f_{sj}^-(v_x < 0)$, что учитывает возможность для молекул, испущенных поверхностью, в результате межмолекулярных столкновений в кнудсеновском слое рассеяться назад к поверхности.

Из граничных условий (1.1)–(1.4) следует

$$x = 0: a_1^+ = 1, a_2^+ = 0 \quad (1.6)$$

$$x = \infty: a_1^+ = 0, a_2^+ = 1, a_1^- = 0, a_2^- = 1$$

Введем обозначения

$$a_1^-(x=0) = \beta_1, a_2^-(x=0) = \beta_2 \quad (1.7)$$

Анализ характера течения показывает, что в случае дозвуковой конденсации ($M < 1$) на бесконечности можно задавать любые два параметра из трех, характеризующих течение (при $M > 1$ – все эти величины): n , T и M , т.е. существует функциональная связь $n(T, M)$, которую требуется установить. Кроме того, при аналитическом рассмотрении задачи возникает вопрос об определении области допустимых значений параметров T и M , при которых решение уравнения Больцмана существует.

2. Решение задачи ищется моментным методом. При этом для определения четырех неизвестных функций $a_n^\pm(x)$ ($n = 1, 2$) составляется система уравнений переноса (являющаяся следствием кинетического уравнения)

$$\frac{d}{dx} \int v_x Q_\mu(v) f_j dv = \int Q_\mu(v) I_{st} dv \quad (2.1)$$

Здесь I_{st} – интеграл столкновений, а моменты $Q_\mu(v)$ – произвольные функции скорости молекул v . Естественно, что в качестве первых трех моментов $Q_\mu(v)$ ($\mu = 1, 2, 3$) берутся инварианты соударения 1, v_x , $mv^2/2 + E_i$ (где E_i – внутренняя энергия молекул), для которых правая часть (2.1) обращается в нуль. При этом полученные уравнения представляют собой условия баланса потоков массы, импульса и энергии в произвольной точке x

$$\begin{aligned} & (\sqrt{\pi} z \operatorname{erfc}(z) - \exp(-z^2)) [a_2^-(x) - a_2^+(x)] + \\ & + \frac{n_S}{n} \theta^{-1/2} [a_1^+(x) - a_1^-(x)] + 2\sqrt{\pi} z a_2^+(x) = 2\sqrt{\pi} z \\ & \left[\left(\frac{1}{2} + z^2 \right) \operatorname{erfc}(z) - \frac{z}{\sqrt{\pi}} \exp(-z^2) \right] [a_2^-(x) - a_2^+(x)] + \\ & + \frac{1}{2} \frac{n_S}{n} \theta^{-1} [a_1^+(x) + a_1^-(x)] + (1 + z^2) a_2^+(x) = 1 + 2z^2 \\ & \left[z \left(\frac{5}{2} + z^2 + \frac{i}{2} \right) \operatorname{erfc}(z) - \left(z^2 + 2 + \frac{i}{2} \right) \frac{\exp(-z^2)}{\sqrt{\pi}} \right] [a_2^-(x) - a_2^+(x)] + \\ & + \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{n_S}{n} \theta^{-3/2} \left(2 + \frac{i}{2} \right) [a_1^+(x) - a_1^-(x)] + 2z \left(\frac{5}{2} + z^2 + \frac{i}{2} \right) a_2^+(x) = 2z \left(\frac{5}{2} + z^2 + \frac{i}{2} \right) \\ & \operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^\infty \exp(-m^2) dm, \quad z = u \sqrt{\frac{m}{2kT}} = \sqrt{\frac{\gamma}{2}} M \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь γ – отношение удельных теплоемкостей, i – число внутренних степеней свободы, $\theta = T/T_S$ – безразмерная температура.

Последнее из уравнений системы (2.2) предполагает равновесное распределение энергии между вращательными степенями свободы и поступательными степенями. Тем самым производится учет неупругости столкновений молекул, т.е. возможности перехода энергии от поступательных степеней к вращательным и обратно.

Из этих уравнений при $x = 0$ с учетом соотношений (1.6) и (1.7) получим газодинамические граничные условия, позволяющие, например, выразить параметры β_1 , n/n_S и β_2 через z и θ .

$$\beta_1 = \frac{(4+i)(\theta-1) + \sqrt{\pi}z\sqrt{\theta}}{(4+i)(\theta-1) - \sqrt{\pi}z\sqrt{\theta}} \quad (2.3)$$

$$\begin{aligned} \frac{n}{n_S} = & \left[\left(\frac{1}{2} + z^2 \right) \operatorname{erfc}(z) \exp(z^2) - \frac{z}{\sqrt{\pi}} \right] \theta^{-1/2} (1 - \beta_1) + \\ & + \frac{1}{2} [1 - \sqrt{\pi}z \operatorname{erfc}(z) \exp(z^2)] \theta^{-1} (1 + \beta_1) \end{aligned} \quad (2.4)$$

$$\beta_2 = \left[(1 - \beta_1)(1 + 2z^2) - \theta^{-1/2} (1 + \beta_1) \sqrt{\pi}z \right] \frac{n_S}{n} \theta^{-1/2} \exp(z^2) \quad (2.5)$$

Из системы (2.2) после несложных преобразований получим выражения для коэффициентов $a_1^+(x)$, $a_1^-(x)$, $a_2^+(x)$ в виде зависимостей от одной неизвестной функции $y(x) = a_2^-(x) - a_2^+(x)$

$$a_1^+(x) = -\frac{1}{2} \frac{n}{n_S} \theta \left[\theta^{-1/2} z \sqrt{\pi} + (4+i) \frac{1-\theta}{\theta} \right] \frac{\exp(-z^2)}{\sqrt{\pi}z} \Psi y(x) \quad (2.6)$$

$$a_1^-(x) = -\frac{1}{2} \frac{n}{n_S} \theta \left[\theta^{-1/2} z \sqrt{\pi} - (4+i) \frac{1-\theta}{\theta} \right] \frac{\exp(-z^2)}{\sqrt{\pi}z} \Psi y(x)$$

$$a_2^+(x) = \left[\varphi_2 - (4+i) \frac{1-\theta}{2\theta} \varphi_1 \right] \Psi y(x) + 1, \quad \Psi = \left[(4+i) \frac{1-\theta}{\theta} - 1 - 2z^2 \right]^{-1}$$

$$\varphi_1 = \operatorname{erfc}(z) - \frac{\exp(-z^2)}{z\sqrt{\pi}}, \quad \varphi_2 = \left(\frac{1}{2} + z^2 \right) \operatorname{erfc}(z) - \frac{z}{\sqrt{\pi}} \exp(-z^2)$$

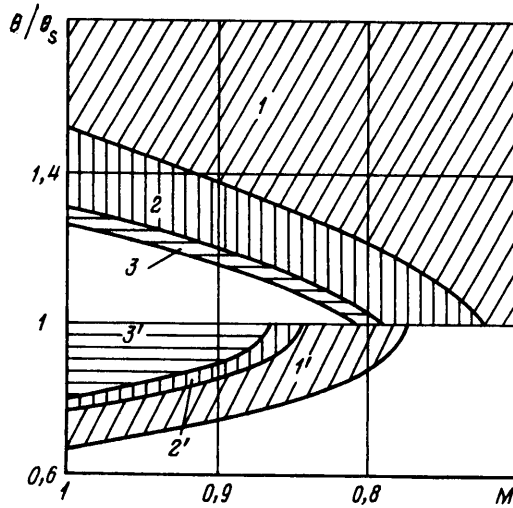
Для нахождения функции $y(x)$ необходимо образовать еще одно дополнительное моментное уравнение. Наиболее простым представляется выбор $Q_4 = u_x^2$, для которого интегрирование правой части (2.1) в случае максвелловских молекул может быть выполнено сравнительно легко. Кроме того, использование этого момента в [17, 18] дает наилучший результат для предельно допустимого значения числа Маха M для случая стационарного испарения, отличающегося от истинного значения $M = 1$ всего на 2%.

Таким образом, неизвестная функция $y(x)$ будет определяться из решения нелинейного дифференциального уравнения, которое с учетом соотношений (2.6) приводится к виду

$$\frac{dy(X)}{dX} = -L \left\{ 1 + \frac{y(X)}{y_1} \right\} y(X) \quad (2.7)$$

$$L = \frac{2}{3} z \frac{(4+i)(\theta + \theta^{-1} - 2) + 1 - 2z^2}{(\theta^{-1} - 1)(1 + i/2)}$$

$$y_1 = 8z\sqrt{\pi} \exp(z^2) \frac{(\theta + \theta^{-1} - 7/4 - z^2/2)(\theta^{-1} - 5/4 - z^2/2)}{(\theta^{-1} - 1)(1 - \theta) - z^2/2}$$



Фиг. 1. Области существования решения уравнения Больцмана (изображены штриховкой) при сильной дозвуковой конденсации одно-, двух- и трехатомных газов

$$X = 6A \sqrt{\frac{4K}{kT}} nx = \frac{x}{\lambda}$$

где λ – длина свободного пробега молекул за кнудсеновским слоем. A и K – константы, характеризующие взаимодействие между молекулами [19].

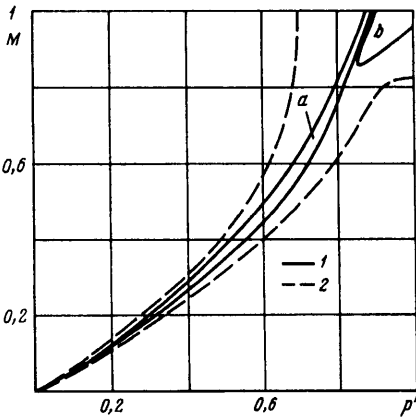
Решение уравнения (2.7) имеет вид

$$y(X) = \frac{y_1}{(y_1 / \beta_2 + 1) \exp(LX) - 1} \quad (2.8)$$

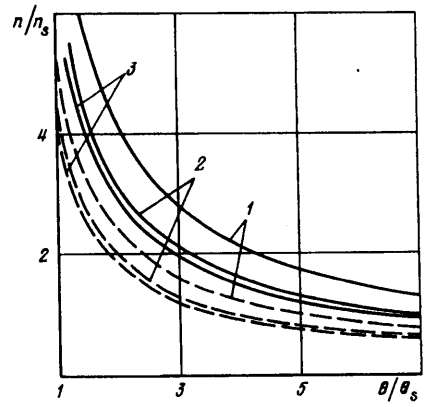
Таким образом, независимыми параметрами, входящими в коэффициенты $a_n^\pm(x)$, являются три величины: M , θ и число внутренних степеней свободы i . Полученное решение $y(X)$ не должно иметь особенностей в физической области $x > 0$, т.е. необходимо потребовать, чтобы знаменатель в выражении (2.8) при $x > 0$ не обращался в нуль. Поскольку параметр $\beta_2 > 0$, то при $y_1 > 0$ последнее требование удовлетворяется автоматически. Рассмотрим случай $y_1 < 0$. При условии, когда $y_1 > -\beta_2$, множитель при экспоненте положителен и по модулю меньше единицы. При этом решение $y(X)$ имеет особенность в некоторой точке $x_0 > 0$. Если $y_1 < -\beta_2$, то множитель при экспоненте отрицателен и решение регулярно во всех точках $x > 0$. Таким образом, область существования физически допустимого решения (2.8) распадается на две области: $y_1 > 0$ и $y_1 < -\beta_2$.

Кроме того, при $x \rightarrow \infty$ решение $y(X)$ должно удовлетворять граничным условиям (1.6), т.е. состояние многоатомного газа за кнудсеновским слоем описывается равновесной функцией распределения со средней скоростью набегающего потока $u < 0$. Для этого необходимо потребовать, чтобы величина L была положительной: $L > 0$. Данное условие наряду с предыдущим приводит к дополнительному ограничению на область существования решения $y(X)$.

3. На фиг. 1 области допустимых значений параметров M и θ , при которых существует решение $y(X)$ для одно-, двух- и трехатомных газов, изображены штриховкой.



Фиг. 2



Фиг. 3

Фиг. 2. Интервалы допустимых значений $M(p')$ при $\gamma = 7/5$ (области a и b , ограниченные кривыми 1); кривые 2 – результат [13]

Фиг. 3. Параметры газа за кнудсеновским слоем при сильной дозвуковой конденсации (штриховые кривые – $M = 0,7$, сплошные – $M = 0,9$) для одно-, двух- и трехатомных газов (кривые 1, 2, 3 соответственно)

Для простоты анализа целесообразно рассмотреть два случая: $\theta > 1$ и $\theta < 1$. Рассмотрим случай $\theta > 1$. Область существования решения для одноатомного газа ($i = 0$) обозначена цифрой 1 (косая штриховка). При переходе к молекулярному газу с $i = 2$ область существования 1 расширяется: к ней добавляется область 2 (вертикальная штриховка). При переходе к трехатомному газу с $i = 3$ к области существования добавляется область 3 (горизонтальная штриховка).

В случае $\theta < 1$ область существования решения для молекулярного газа с $i = 3$ обозначена 3' (горизонтальная штриховка). Область существования решения для двухатомного газа расширяется за счет присоединения области 2' (вертикальная штриховка), а для одноатомного газа область существования наряду с областями 3' и 2' включает еще и область 1' (косая штриховка).

На фиг. 2 сравниваются результаты данной работы с результатами [13] для двухатомного газа ($\gamma = 7/5$) в координатах M , $p' = (p - p_s)/p$ (где $p = nkT$, $p_s = n_s k T_s$). Область a , ограниченная сплошными кривыми, соответствует областям 1 и 2, изображенным на фиг. 1 для случая $\theta > 1$, область b – областям 2' и 3' для случая $\theta < 1$. Видно, что обе области a и b располагаются внутри интервала предельно допустимых значений параметров (штриховые кривые) $M_{\min}(p, T) \leq M \leq M_{\max}(p, T)$, полученного в [13].

На фиг. 3 построены зависимости концентрации газа n/n_s от температуры θ при различных значениях числа Маха.

Заключение. Возбуждение внутренних степеней свободы молекул оказывает существенное влияние на структуру областей существования решения уравнения Больцмана. Полученные результаты находятся в хорошем согласии с ранее известными ограничениями на физические параметры за слоем Кнудсена [13]. Из результатов работы следует, что при заданных значениях числа Маха M и температуры T концентрация газа n за слоем Кнудсена уменьшается с ростом числа вращательных степеней свободы. При переходе от одноатомного газа к двухатомному максимальное изменение концентрации n/n_s вблизи $M = 1$ в допустимом диапазоне температур составляет $\sim 36\%$. При этом различие между параметрами двухатомных и трехатомных газов не превышает $\sim 8\%$.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Абрамов А.А., Коган М.Н., Макашев Н.К.* Численное исследование процессов в сильно неравновесных слоях Кнудсена // Изв. АН СССР. МЖГ. 1981. № 3. С. 72–81.
2. *Frezzotti A.* Numerical investigation of the strong evaporation of a polyatomic gas // *Rar. Gas Dynam. Weinheim: VCH – Verlag, 1991. V. 2. P. 1243–1251.*
3. *Cercignani C.* Strong evaporation of polyatomic gas // *Rar. Gas Dynam. N.Y.: AIAA, 1981. V. 1. P. 305–320.*
4. *Коган М.Н., Макашев Н.К.* О роли слоя Кнудсена в теории гетерогенных реакций и в течениях с реакциями на поверхности // Изв. АН СССР. МЖГ. 1971. № 6. С. 3–11.
5. *Kogan M.N.* Evaporation / condensation kinetics // *Rar. Gas Dynam. Oxford: Univ. Press, 1995. V. 1.*
6. *Абрамов А.А., Коган М.Н.* Сильная дозвуковая конденсация одноатомного газа // Изв. АН СССР. МЖГ. 1989. № 1. С. 165–169.
7. *Абрамов А.А., Коган М.Н.* О режиме сверхзвуковой конденсации газа // Докл. АН СССР. 1984. Т. 278. № 5. С. 1078–1081.
8. *Yen S.M.* Numerical solutions of the Boltzmann and Krook equations for a condensation problem // *Rar. Gas Dynam. N.Y.; AIAA, 1981. V. 2. P. 356–362.*
9. *Ytrehus T., Alvestad J.* A Mott-Smith solution for non-linear condensation // *Rar. Gas Dynam. N.Y.: AIAA, 1981. V. 1. P. 330–345.*
10. *Hatakeyama M., Oguchi H.* Kinetic approach to non-linear condensation of flowing vapor // *Rar. Gas Dynam. Paris: CEA, 1979. V. 2. P. 1293–1303.*
11. *Labuntsov D.A., Kryukov A.P.* Analysis of intensive evaporation and condensation // *Intern. J. Heat and Mass Transfer. 1979. V. 22. № 7. P. 989–1001.*
12. *Кузнецова И.А., Юшканов А.А., Яламов Ю.И.* Сильная дозвуковая конденсация одноатомного газа с учетом коэффициента испарения // Изв. РАН. МЖГ. 1997. № 2. С. 183–190.
13. *Бронин С.Я., Полищук В.П.* Кнудсеновский слой при испарении и конденсации // Теплофизика высоких температур. 1984. Т. 22. № 3. С. 550–556.
14. *Жданов В.М., Алиевский М.Я.* Процессы переноса и релаксации в молекулярных газах. М.: Наука, 1989. 335 с.
15. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теоретическая физика. Т. 5. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976. 584 с.
16. *Mott-Smith G.* Решение уравнения Больцмана для ударной волны // *Механика. Сб. перев. и обзоров иностр. период. лит-ры. 1953. № 1. С. 72–85.*
17. *Ytrehus T.* Theory and experiments in gas kinetics in evaporation // *Rar. Gas Dynam. N.Y.: AIAA, 1977. V. 2. P. 1197–1212.*
18. *Кузнецова И.А., Юшканов А.А., Яламов Ю.И.* Применение метода Мотт-Смита к решению задачи о сильном испарении с плоской поверхности // Теплофизика высоких температур. 1992. Т. 30. № 2. С. 345–350.
19. *Коган М.Н.* Динамика разреженного газа. Кинетическая теория. М.: Наука, 1967. 440 с.

Ярославль,
Москва

Поступила в редакцию
23.IV.1996