

ФАЗОВЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ТЕЧЕНИЯХ ГАЗА ДИТЕРИЧИ

Лычагин В.В., Рооп М.Д.

Институт проблем управления им. В.А. Трапезникова РАН,

Россия, г. Москва, ул. Профсоюзная д.65

valentin.lychagin@uit.no, mihail_roop@mail.ru

Аннотация: В статье изучаются стационарные течения реальных газов, описываемые уравнениями Эйлера, в трехмерном пространстве. В качестве модели термодинамического состояния принимается уравнение Дитеричи. Изучены критические явления, возникающие вдоль потока таких газов. Предъявлено решение уравнений Эйлера в случае источника и построены области возникновения фазового перехода.

Ключевые слова: уравнение состояния Дитеричи, фазовые переходы, уравнения Эйлера, термодинамика.

Введение

Течения невязких газов в трехмерном пространстве описываются системой уравнений в частных производных, состоящей из уравнений Эйлера [1]:

$$(1) \quad \rho(\mathbf{u}, \nabla)\mathbf{u} = -\nabla p,$$

и уравнения неразрывности:

$$(2) \quad \operatorname{div}(\rho \mathbf{u}) = 0,$$

в дополнение к (1) и (2) мы предполагаем постоянство удельной энтропии $\sigma(x)$ вдоль потока:

$$(3) \quad (\mathbf{u}, \nabla \sigma) = 0.$$

В системе (1)-(3) $\rho(x)$ - плотность среды, $p(x)$ - давление, $\mathbf{u}(x) = (u_1, u_2, u_3)$ - поле скоростей, $x \in \mathbb{R}^3$.

Система (1)-(3) является незамкнутой, поскольку не определены термодинамические свойства среды. Для того чтобы ее замкнуть, требуются уравнения состояния. Наиболее важными с практической точки зрения моделями являются уравнения состояния реальных газов, содержащие в себе возможность фазовых переходов, которые в контексте уравнений динамики сплошных сред можно интерпретировать как критические явления на решениях дифференциальных уравнений. Введение в рассмотрение уравнений состояния позволяет строить на физическом пространстве области, соответствующие различным фазам, что находит практическое применение, в частности, в задачах фильтрации [2,3].

1 Термодинамика

Под термодинамическим состоянием будем понимать двумерное Лагранжево многообразие L в четырехмерном симплектическом пространстве $\mathbb{R}^4(e, v, p, T)$, где координаты означают соответственно удельную энергию, удельный объем ($v = \rho^{-1}$), давление и температуру, заданное двумя функциями [4,5]:

$$(4) \quad L = \{f(e, v, p, T) = 0, g(e, v, p, T) = 0\},$$

находящимися в инволюции относительно скобки Пуассона $[f, g]$ в силу уравнений состояния:

$$(5) \quad [f, g]|_L = 0,$$

где $[f, g]$ однозначно определяется соотношением

$$(6) \quad [f, g] \Omega \wedge \Omega = df \wedge dg \wedge \Omega.$$

Форма Ω задает на $\mathbb{R}^4(e, v, p, T)$ структуру симплектического пространства и имеет следующий вид:

$$(7) \quad \Omega = d(T^{-1}) \wedge de + d(pT^{-1}) \wedge dv.$$

Как правило, из экспериментов известно только одно уравнение состояния – термическое. Условие (5) позволяет установить второе уравнение состояния – калорическое, тем самым полностью определяя Лагранжево многообразие L .

На Лагранжевом многообразии L определена дифференциальная квадратичная форма κ [4]:

$$(8) \quad \kappa = d(T^{-1}) \cdot de + d(T^{-1}p) \cdot dv$$

Те области на L , в которых дифференциальная квадратичная форма (8) является отрицательно определенной, соответствуют физически реализуемым состояниям [4]. Наиболее удобно описывать Лагранжевы многообразия в термодинамике можно с помощью потенциала Массье-Планка $\phi(v, T)$, который естественным образом возникает из условия совместности термического и калорического уравнений состояния (5). В частности, Лагранжево многообразие L задается с помощью него следующими соотношениями [5]:

$$(9) \quad p = RT\phi_v, \quad e = RT^2\phi_T,$$

где R - универсальная газовая постоянная. Удельная энтропия σ и удельный потенциал Гиббса $\gamma = e - T\sigma + pv$ выражаются следующим образом:

$$(10) \quad \sigma = R(\phi + T\phi_T), \quad \gamma = RT(v\phi_v - \phi).$$

Физически реализуемые области (фазы) отделены друг от друга подмногообразием $l_{\text{sing}} \subset L$, на котором вырождается дифференциальная квадратичная форма (8). Переход из одной физически реализуемой точки (e_1, v_1, p, T) в другую (e_2, v_2, p, T) , сопровождающийся сохранением удельного потенциала Гиббса и интенсивных величин (p, T) - фазовый переход. Кривая, на которой происходит фазовый переход на Лагранжевом многообразии, в силу (9), (10) задается соотношениями:

$$(11) \quad \phi_v(v_1, T) = \frac{p}{RT}, \quad \phi_v(v_2, T) = \frac{p}{RT}, \quad \phi(v_1, T) - v_1\phi_v(v_1, T) = \phi(v_2, T) - v_2\phi_v(v_2, T).$$

2 Газ Дитеричи

Уравнение состояния Дитеричи является некубическим уравнением состояния, предложенным в [6]. Термическое уравнение состояния имеет следующий вид:

$$(12) \quad f(e, v, p, T) = p - \frac{RT}{v-b} \exp\left(-\frac{a}{RTv}\right),$$

где a и b - это константы, описывающие соответственно взаимодействие молекул и их объем. Ограничивая скобку Пуассона $[f, g]$ на L , мы получаем калорическое уравнение состояния:

$$(13) \quad g(e, v, p, T) = \frac{nRT}{2} + \frac{a}{b} \exp\left(-\frac{a}{RTv}\right) \text{Ei}\left(\frac{a(v-b)}{RTvb}\right) - e,$$

где $\text{Ei}(z) = \int_{-\infty}^z \tau^{-1} e^{\tau} d\tau$ - экспоненциальный интеграл, а n - число степеней свободы. Таким образом, соотношения (12) и (13) определяют Лагранжево многообразие для газов Дитеричи.

Для построения кривой фазового перехода требуется также вычислить потенциал Массье-Планка. Он имеет следующий вид:

$$(14) \quad \phi(v, T) = \ln(T^{n/2}) + \text{Ei}_1\left(\frac{a}{RTv}\right) + e^{-a/RTb} \text{Ei}\left(\frac{a(v-b)}{RTvb}\right),$$

где $\text{Ei}_1(z) = \int_1^{\infty} e^{-\tau z} \tau^{-1} d\tau$. Численно решая уравнения (1) относительно (v_1, v_2) для заданных давления p и температуры T , мы находим точки фазового перехода, и соответствующая кривая изображена на Рис. 1.

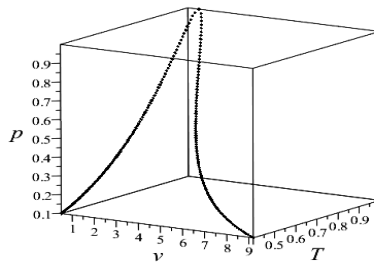


Рис. 1. Кривая фазового перехода для газов Дитеричи

3 Решение уравнений Эйлера

Уравнение (3) в случае изотропного источника интенсивности J и расположенного в точке x_0 , приводит к постоянству удельной энтропии $\sigma(x) = R\sigma_0$. Заданный уровень удельной энтропии позволяет выразить все термодинамические переменные через удельный объем [2,5], то есть $T = T(v)$, $p = p(v)$. Решение уравнений Эйлера в этом случае дается следующей теоремой [7]:

Теорема. Общее решение задачи (1)-(3) для в случае источника интенсивности J задано неявно следующим образом:

$$(15) \quad \frac{v^2}{2|x-x_0|^4} + \left(\frac{4\pi}{J}\right)^2 \int v p'(v) dv - C_0 = 0,$$

где C_0 - постоянная интегрирования.

График решения изображен на Рис. 2(а). Каждая ветвь многозначного решения (15) определяется значением плотности (удельного объема) на бесконечности [7].

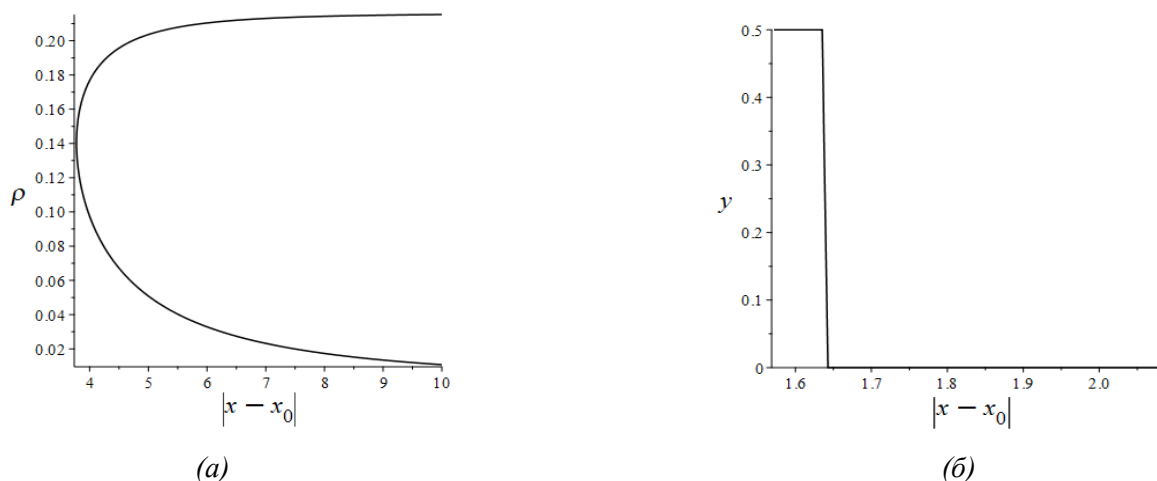


Рис. 2. График решения уравнений Эйлера (а) и соответствующее распределение фаз в пространстве (б)

Располагая решением задачи (1)-(3) и кривой фазового перехода в пространстве термодинамических переменных, можно перенести эту кривую на физическое пространство, определив тем самым, области, соответствующие различным фазам. Распределение фаз показано на Рис. 2(б). Значение переменной $y = 0$ соответствует газу, $y = 0.5$ - процессу конденсации. Видно, что в окрестности источника наблюдается конденсация газа.

Литература

1. Batchelor G.K. An introduction to fluid dynamics. – Cambridge: Cambridge University Press, 2000. – 615 pp.
2. Lychagin V., Roop M. Phase transitions in filtration of Redlich-Kwong gases // Journal of Geometry and Physics. Vol. 143. 2019. – P.33-40.
3. Lychagin V., Roop M. Steady filtration of Peng-Robinson gases in a porous medium // Global and Stochastic Analysis. Vol. 6. 2019, № 2. – P.1-10, in press.
4. Lychagin V. Contact Geometry, Measurement and Thermodynamics, in Nonlinear PDEs, Their Geometry and Applications. Proceedings of the Wisla 18 Summer School, R. Kycia, M. Ulan, E. Schneider, Eds. – Cham: Birkhäuser Basel. 2019. P. 3–52.
5. Lychagin V., Roop M. Phase transitions in filtration of real gases, <https://arxiv.org/abs/1903.00276>, unpublished.
6. Dieterici C. Ueber den kritischen Zustand // Ann. Phys. Chem. Vol. 69. 1899. – P.685-705.
7. Lychagin V., Roop M. Real gas flows issued from a source, <https://arxiv.org/abs/1905.03999>, unpublished.