

01;03

## О нелинейных эффектах в моделях конденсации при непрерывном и дискретном описании нуклеации

© Ю.Е. Горбачев

Институт высокопроизводительных вычислений и информационных систем,  
191187 Санкт-Петербург, Россия  
e-mail: gorbachev@hm.csa.ru

(Поступило в Редакцию 28 октября 2002 г.)

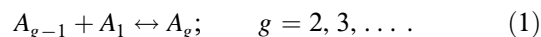
Предложена система нелинейных уравнений для описания эволюции доли конденсата. Показана принципиальная неприменимость диффузионного приближения в рамках уравнения Зельдовича для описания нелинейных эффектов. Получено диффузионное уравнение, не имеющее ограничения области применимости, связанного с малостью пересыщения.

### Введение

Выводу уравнений, описывающих течения, сопровождающиеся процессом конденсации, посвящено большое число статей [1–3]. Несмотря на то что процедура такого вывода непосредственно связана с переходом от детального описания системы к сокращенному [4,5], с этой точки зрения он не рассматривался. Это связано прежде всего со сложностью разделения быстрых и медленных переменных, описывающих процессы нуклеации и конденсации. Дело в том, что конденсация характеризуется рядом характерных времен. Так, в работе [6] было показано, что эволюция функции распределения кластеров по размерам к своему квазистационарному значению определяется не одним характерным временем, а целым набором: кинетическим временем релаксации  $\tau_k$ , введенным в работах [7,8], и бесконечным рядом парциальных времен задержки  $\tau_d(g)$ , зависящих от размера кластера ( $g$ -мера). Наличие этого ряда времен задержки делает процесс релаксации и образования конденсированной фазы весьма специфическим. В работе [6] показано, что  $\tau_d(g)$  монотонно растет с увеличением  $g$ , причем для докритических кластеров  $g < g_*$  время задержки меньше времени релаксации, а следовательно, выход функции распределения кластеров по размерам на свое квазистационарное значение регламентируется исключительно кинетическим временем. Для закритических кластеров соотношение этих времен становится противоположным и, начиная с некоторого размера  $g_M$ ,  $\tau_d(g)$  сравнивается с характерным газодинамическим временем  $\tau_h$ , т.е. достаточно большие кластеры эволюционируют лишь на временах масштаба  $\tau_h$ . Из вышесказанного следует, что критический размер разделяет кластеры, которые уже на кинетических временах  $\tau_k$  в основном успевают отрелаксировать к своему квазистационарному распределению [6] (докритические кластеры) от кластеров, которые на этих временах только начинают релаксировать (закритические кластеры). Это согласуется с определением  $\tau_k$  как времени, на котором формируется кластер критического размера [7,8].

Конденсатом принято называть кластеры закритического размера  $g > g_*$ , связывая это с их устойчивостью. Дополнительным аргументом к такому выбору можно считать и описанную выше особенность релаксации кластеров. Эта особенность позволяет также считать, что при формировании конденсата ток через критический размер близок к своему квазистационарному значению [6]. Уравнение, описывающее поведение конденсата, может быть получено из кинетических уравнений для функции распределения кластеров по размерам.

Анализ процесса конденсации в рамках кинетического подхода, начиная с работы [9], проводился на основе системы уравнений квазихимической модели конденсации. В рамках этой модели считается, что рост кластеров определяется реакциями ассоциации — присоединения мономера к  $g$ -меру (кластеру из  $g$ -мономеров), а их распад — реакцией мономолекулярного распада  $g$ -мера на  $(g - 1)$ -мер и мономер



Константу скорости реакции ассоциации (1) будем обозначать  $K_{g-1}^+$ , а соответствующую константу скорости распада —  $K_g^-$ . Тогда эволюция функции распределения кластеров по размерам  $n_g$  определяется системой уравнений

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u} n_1) = -I_2 - \sum_{j=2}^{\infty} I_j, \quad (2)$$

$$\frac{\partial n_g}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u} n_g) = I_g - I_{g+1},$$

$$I_g = -K_g^- n_g + K_{g-1}^+ n_1 n_{g-1}; \quad g = 2, \dots, \infty. \quad (3)$$

Величина  $I_g$  определяет скорость образования  $g$ -меров в единице объема в результате вышперечисленных реакций или ток кластеров в пространстве размеров. Корректность уравнения (2), а также всех его дальнейших модификаций и следствий основывается на одном из результатов работы [6], заключающемся в том, что при

$g > g_m(t)$  ток в пространстве размеров отсутствует. Это означает, что  $g j_g = 0$  при  $g \rightarrow \infty$ , а также сходимость суммы на верхнем пределе в правой части равенства (2).

Константы скоростей  $K_g^+$  и  $K_g^-$  связаны между собой соотношением, вытекающим из закона действующих масс,

$$K_g^- = K_g^0 K_g^+, \quad K_g^0 = n_{g-1}^e / n_g^e, \quad (4)$$

где  $K_g^0$  — константа равновесия,  $n_g^e$  — равновесная функция распределения,

$$n_g^e = n_1 \exp\left(-\frac{\Phi(g)}{kT}\right), \quad n_1^e = n_1, \quad (5)$$

обращающая в нуль ток кластеров в пространстве размеров  $I_g(n_g^e) = 0$ ,  $\Phi(g)$  — минимальная работа образования  $g$ -мера,  $T$  — температура газа мономеров.

Помимо равновесного распределения выделяется стационарное  $n_g^s$ , определяемое соотношением  $I(n_g^s) = \text{const} = I^s$ . В последнем случае для  $g \geq 2$  имеем  $\dot{n}_g = 0$ , однако  $\dot{n}_1 \neq 0$ .

Наряду с дискретным описанием процесса нуклеации на основе системы уравнений (3) в работах [10,11] был предложен его непрерывный аналог в виде уравнения диффузии в пространстве размеров. С использованием закона действующих масс (4) выражение для тока зародышеобразования  $I_g$  может быть записано в виде (с использованием выражения (5))

$$\begin{aligned} I_g &= K_{g-1}^+ n_1 n_{g-1}^e \left( \frac{n_{g-1}}{n_{g-1}^e} - \frac{n_g}{n_g^e} \right) \approx -K_{g-1}^+ n_1 n_g^e \frac{\partial}{\partial g} \frac{n_g}{n_g^e} \\ &= -D_g \left( \frac{\partial n_g}{\partial g} - n_g \frac{\partial \ln n_g^e}{\partial g} \right) \\ &= -D_g \left( \frac{\partial n_g}{\partial g} + \frac{n_g}{kT} \frac{\partial \Phi(g)}{\partial g} \right) = j_g, \end{aligned} \quad (6)$$

где  $D_g = K_{g-1}^+ n_1$  — коэффициент диффузии.

Заменяя в уравнении (3) конечную разность в правой части на производную, получим уравнение диффузионного типа для функции  $n_g$

$$\frac{\partial n_g}{\partial t} + \nabla(\mathbf{u} n_g) = -\frac{\partial j_g}{\partial g}. \quad (7)$$

Это уравнение с током  $j$ , определяемым соотношением (6), должно быть дополнено граничными условиями при  $g = 1$  и  $g = \infty$ . В качестве первого из них естественно взять уравнение (2), а второе обычно записывается в виде  $n_g/n_g^e \rightarrow 0$  при  $g \rightarrow \infty$ . Для замыкания описания системы это уравнение необходимо дополнить уравнением для  $n_1$ , которое, исходя из (2), может быть записано в виде (по поводу сходимости интеграла см. комментарий после (2))

$$\dot{n}_1 / \partial t + \nabla(\mathbf{u} n_1) = j_2 + \sum_{g=2}^{\infty} j_g \approx \int_1^{\infty} j_g dg. \quad (8)$$

Обе рассмотренные выше функции  $n_g^e$  и  $n_g^s$  определяются набором термодинамических функций, описывающих макроскопическое состояние системы. Их принято называть медленными, или газодинамическими, переменными. Увеличение скорости изменения одной из них, например концентрации мономеров, приведет к отклонению функции распределения от его стационарного значения, причем, как показано в работе [6], соответствующее квазистационарное распределение является функцией производной по времени от стационарной функции распределения, т. е.  $\dot{n}_g^s$ . В этом смысле мы будем говорить о выходе за рамки классического описания. Данные, свидетельствующие о необходимости выхода за рамки такого описания и о зависимости протекания процесса конденсации не только от газодинамических параметров, но и от скорости их изменения, обсуждались в [12,13].

Отклонение тока зародышеобразования от своего стационарного значения приводит к его зависимости от размера кластера, однако, как будет видно из дальнейшего анализа, для описания поведения доли конденсата достаточно знать его значение только для критического размера зародыша, которое, как отмечалось выше, можно считать равным своему квазистационарному значению.

В работе предложены варианты различной точности описания поведения доли конденсата. Путем сопоставления дискретного и непрерывного описаний оценена точность последнего. Показано, что при непрерывном подходе не удастся получить правильного описания поведения доли конденсата при сильных пересыщениях.

## Доля конденсата

Процесс конденсации обычно описывается в терминах массы конденсата [1,2], за которую принимается масса закритических зародышей

$$\alpha = \left( \int_{g_*}^{\infty} m_1 g n_g dg \right) / \rho_{\Sigma}, \quad \rho_{\Sigma} = \int_1^{\infty} m_1 g n_g dg,$$

где  $m_1$  — масса мономера.

Для вывода уравнения эволюции массы конденсата воспользуемся той же системой уравнений (8), (7) для функции распределения кластеров по размерам  $n_g(g, t)$ , что и при решении задачи нуклеации (не прибегая к новым кинетическим уравнениям, содержащим источник-ый член, пропорциональный  $\delta$ -функции  $\delta(g - g_*)$  [2]).

Исходя из определения (9) и используя уравнение (7) для нахождения временной производной от функции распределения, после дифференцирования и интегрирования по частям получим

$$\begin{aligned} \frac{d\alpha}{dt} &= \frac{m_1}{\rho_{\Sigma}} \left( \int_{g_*}^{\infty} j dg + g_* \left( j_* - n_{g_*} \frac{dg_*}{dt} \right) \right), \\ \frac{d}{dt} &= \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u} \nabla. \end{aligned} \quad (10)$$

Поскольку процесс конденсации заведомо рассматривается на временах, много больших кинетического  $\tau_k$ , то, согласно выводам работы [6], уравнение (10) можно упростить, заменяя в нем  $n_{g^*}$  и  $j_*$  на их квазистационарные значения  $n_{g^*}^{qs}$  и  $j_*^{qs}$  соответственно. Воспользуемся для тока выражением (6), а для работы образования капли выражением

$$\frac{\Phi(g)}{kT} = a(g-1)^{2/3} - b(g-1),$$

$$a = \frac{4\pi\sigma}{kT} \left( \frac{3v_l}{4\pi} \right)^{2/3}, \quad b = \ln s, \quad (11)$$

где  $\sigma$  — коэффициент поверхностного натяжения;  $v_l$  — объем, приходящийся на мономер в жидкой фазе;  $s$  — пересыщение, а для коэффициента диффузии — выражением

$$D_g = K_g^+ n_1 \simeq K_1^+ n_1 g^{2/3} = D_*(g/g_*)^{2/3}. \quad (12)$$

Тогда, выполняя в (10) интегрирование по частям

$$\int_{g^*}^{\infty} j dg = - \int_{g^*}^{\infty} D_g n_g^e \frac{\partial}{\partial g} \left( \frac{n_g}{n_g^e} \right) dg$$

$$= D_* \left( n_{g^*} + g_*^{-2/3} \int_{g^*}^{\infty} n_g \left( \frac{2}{3} g^{-1/3} - \frac{2}{3} a g^{1/3} + g^{2/3} \ln s \right) dg \right),$$

вводя обозначения для моментов функции распределения

$$\Omega_\nu = \int_{g^*}^{\infty} g^{\nu/3} n_g dg \quad (13)$$

и пользуясь тем, что  $2a/3 = g_*^{1/3} \ln s$ , получим

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{m_1}{\rho_\Sigma} \left( D_* \left( n_{g^*}^{qs} + g_*^{-2/3} (\Omega_2 - g_*^{1/3} \Omega_1) \ln s + \frac{2}{3} \Omega_{-1} \right) + g_* \left( j_*^{qs} - n_{g^*}^{qs} \frac{dg_*}{dt} \right) \right). \quad (14)$$

Согласно [6], квазистационарный ток кластеров критического размера  $j_*^{qs}$  имеет вид

$$j_*^{qs} = j^s \left( 1 - \xi \left( 1 - \sqrt{1 + \xi^{-2} \tilde{\mu}_*} \right) \right) \exp \left[ -\tilde{\mu}_* \tau_b / \tau_k \right]$$

$$+ 2\xi \left( 1 - \sqrt{1 + \xi^{-2} \tilde{\mu}_*} \right) / \sqrt{\pi} \simeq j^s \left( \frac{\varepsilon}{3} \right)^{2\tilde{\mu}_* / \pi},$$

$$\xi = \left( 1 + \frac{\sqrt{\pi} \dot{g}_*}{4} \tau_k \right), \quad \tau_k = \frac{\pi \Delta^2}{4D_*},$$

$$\dot{g}_* = \frac{d}{dt} g_*, \quad \tilde{\mu}_* = \tau_k \frac{d \ln n_*^s}{dt},$$

$$\frac{\tau_b}{\tau_k} = -\frac{1}{\tau_k} \int_1^{g_*^{-\Delta}} \frac{dg'}{(\dot{g}(g') + g' \dot{g}_* / g_*)} \simeq \frac{2}{\pi} \ln \frac{3}{\varepsilon},$$

$$\varepsilon = \Delta / g_*, \quad \Delta = \left( -\frac{1}{2kT} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial g^2} \Big|_* \right)^{-1/2},$$

где скорость сноса в пространстве размеров может быть записана в виде

$$\dot{g} = -\frac{j^s}{n_g^s} + D_g \frac{\partial \ln n_g^s}{\partial g} = -\left( \frac{2j^s}{n_g^s} + \frac{D_g}{kT} \frac{\partial \Phi}{\partial g} \right). \quad (16)$$

Дифференцируя соотношение (13) по времени и используя уравнение (7), получим

$$\frac{d\Omega_\nu}{dt} + \Omega_\nu \nabla \mathbf{u} = \frac{\nu}{3} D_* \left( g_*^{\nu/3-1} n_{g_*}^{qs} + \frac{\nu-1}{3} \Omega_{\nu-4} + g_*^{-2/3} (\Omega_{\nu-1} - g_*^{1/3} \Omega_{\nu-2}) \ln s \right) + g_*^{\nu/3} \left( j_*^{qs} - n_{g_*}^{qs} \frac{dg_*}{dt} \right); \quad \nu = 1, 2, \quad (17)$$

$$\frac{d\Omega_0}{dt} + \Omega_0 \nabla \mathbf{u} = j_*^{qs} - n_{g_*}^{qs} \frac{dg_*}{dt}. \quad (18)$$

Пренебрегая  $\Omega_{-2}$  по сравнению с  $\Omega_1$  в уравнении для  $\Omega_2$ , для  $\nu = 2$  и  $1$ , получим

$$\frac{d\Omega_2}{dt} + \Omega_2 \nabla \mathbf{u} = \frac{2}{3} \frac{D_*}{g_*^{2/3}} \left( g_*^{1/3} n_{g_*}^{qs} + (\Omega_1 - g_*^{1/3} \Omega_0) \ln s \right) + g_*^{2/3} \left( j_*^{qs} - n_{g_*}^{qs} \frac{dg_*}{dt} \right), \quad (19)$$

$$\frac{d\Omega_1}{dt} + \Omega_1 \nabla \mathbf{u} = \frac{1}{3} \frac{D_*}{g_*^{2/3}} \left( n_{g_*}^{qs} + (\Omega_0 - g_*^{1/3} \Omega_{-1}) \ln s \right) + g_*^{1/3} \left( j_*^{qs} - n_{g_*}^{qs} \frac{dg_*}{dt} \right). \quad (20)$$

Обрывая цепочку уравнений для  $\Omega_\nu$  на  $\nu = -1$ , будем пользоваться замыкающим соотношением

$$\Omega_{-1} \Omega_1 = \Omega_0^2. \quad (21)$$

В результате для описания поведения доли конденсата получим замкнутую систему из пяти уравнений (14), (18)–(21). Если в уравнении (17) при  $\nu = 2$  не пренебрегать величиной  $\Omega_{-2}$ , то потребуются еще одно замыкающее соотношение, в качестве которого можно воспользоваться уравнением, аналогичным (21)

$$\Omega_{-2} \Omega_2 = \Omega_0^2. \quad (22)$$

В результате поведение доли конденсата может быть описано системой из шести уравнений (14), (17) с  $\nu = 1, 2$ , (18), (21) и (22).

## Особенности дискретного подхода

Уравнение Зельдовича широко используется при исследовании процесса нуклеации, однако область его применимости а priori оценить достаточно сложно. Часто это становится возможным только в результате сравнения а posteriori с результатами, полученными в рамках дискретного подхода, основанного на квазихимической модели конденсации (2), (3). При проведении такого анализа удобно в обоих случаях перейти к новым переменным  $\tilde{n}_g$  [6]

$$\tilde{n}_g = n_g/n_g^s. \quad (23)$$

В результате из уравнения (7) получим

$$\frac{d\tilde{n}_g}{dt} + \tilde{n}_g \nabla \mathbf{u} = \dot{g} \frac{\partial \tilde{n}_g}{\partial g} + \frac{\partial}{\partial g} D_g \frac{\partial \tilde{n}_g}{\partial g} - \tilde{n}_g \frac{d \ln n_g^s}{dt}, \quad (24)$$

где скорость сноса в пространстве размеров  $\dot{g}$  определяется выражением (16), а из (3) получим

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{n}_g}{dt} + \tilde{n}_g \nabla \mathbf{u} = & n_1 K_g^+ \left( 1 - \frac{I^s}{n_1 K_g^+ n_g^s} \right) \Delta \tilde{n}_{g+1} \\ & - n_1 K_{g-1}^+ \left( 1 - \frac{I^s}{n_1 K_{g-1}^+ n_{g-1}^s} \right) \Delta \tilde{n}_g \\ & - \left( \frac{I^s}{n_{g-1}^s} + \frac{I^s}{n_g^s} \frac{K_g^+}{K_{g-1}^+} \right) \Delta \tilde{n}_g \\ & + n_1 K_g^+ \left( 1 - \frac{n_{g-1}^e}{n_g^e} \right) \Delta \tilde{n}_g - \tilde{n}_g \frac{d \ln n_g^s}{dt}, \end{aligned} \quad (25)$$

где введено обозначение  $\Delta \tilde{n}_g = \tilde{n}_g - \tilde{n}_{g-1}$ .

Переходя от дискретной формы записи к непрерывной, получим уравнение диффузии с модифицированными (по сравнению с уравнением (24), полученным из уравнения Зельдовича (7)), коэффициентом диффузии и скоростью сноса в пространстве размеров

$$\begin{aligned} \frac{d\tilde{n}_g}{dt} + \tilde{n}_g \nabla \mathbf{u} = & \dot{g}^* \frac{\partial \tilde{n}_g}{\partial g} + \frac{\partial}{\partial g} D_g^* \frac{\partial \tilde{n}_g}{\partial g} - \tilde{n}_g \frac{d \ln n_g^s}{dt}, \\ D_g^* = & D_g \left( 1 - \frac{I^s}{n_1 K_{g-1}^+ n_{g-1}^s} \right), \\ \dot{g}^* = & - \frac{I^s}{n_{g-1}^s} + n_1 K_g^+ \left( 1 - \frac{n_{g-1}^s}{n_g^s} \right), \end{aligned} \quad (26)$$

величина  $D_g$  определяется соотношением (12). Заметим, что переход к уравнению диффузии (26) с использованием новых переменных (23) более оправдан, поскольку в широком диапазоне размеров кластеров это отношение является более плавной функцией  $g$ , чем  $n_g/n_g^e$ , используемое при получении уравнения Зельдовича.

Оценивая выражения для коэффициента диффузии и скорости сноса в (26) при  $g = g_*$  с учетом

приближенного выражения для стационарного тока  $j^s = \left( \int_1^\infty D_g n_g^e \right)^{-1} dg \simeq D_* n_*^e / (\Delta \sqrt{\pi})$ , для величин, вычисленных при  $g = g_*$ , получим

$$\begin{aligned} \dot{g}_*^* &= \dot{g}_* \left( 1 - \frac{1}{\Delta \sqrt{\pi}} \right), \\ D_*^* &= D_* \left( 1 - \frac{2}{\Delta \sqrt{\pi}} \right), \quad \Delta \simeq \frac{3g_*^{2/3}}{\sqrt{a}} = \frac{4a^{3/2}}{3 \ln^2 s}. \end{aligned} \quad (27)$$

Из этих соотношений видно, что отличие выражений, полученных в рамках непрерывности и дискретного описания, определяется полушириной  $\Delta$  равновесного распределения кластеров по размерам  $n_g^e$  вблизи своего минимального значения в точке  $g = g_*$ . Отсюда видно, что при малых  $\Delta$  диффузионное описание эволюции функции распределения  $n_g$  (т.е. уравнение (7)) оказывается неприменимым.

Описывающее эволюцию функции  $\tilde{n}_g$  и полученное непосредственно из уравнений квазихимической модели уравнение (26) с уточненным выражением для потока в пространстве размеров и коэффициентом диффузии позволяет в рамках диффузионного приближения описывать ситуации и с малыми значениями  $\Delta$ . По сути дела оно является обобщением уравнения Зельдовича, не имеющем ограничения применимости, связанного с малостью пересыщения (что соответствует большому  $\Delta$ ).

Выясним теперь отличия, к которым приводит использование дискретного подхода для описания процесса образования доли конденсата.

Введем понятие доли конденсата в рамках дискретного подхода

$$\alpha = \left( \sum_{g_*}^\infty m_1 g n_g \right) / \rho_\Sigma, \quad \rho_\Sigma = \sum_1^\infty m_1 g n_g. \quad (28)$$

Исходя из уравнений (3), получим уравнение, описывающее эволюцию массы конденсата,

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{m_1}{\rho_\Sigma} \left( \sum_{g_*+1}^\infty I_g + g_* \left( I_* - n_{g_*} \frac{dg_*}{dt} \right) \right). \quad (29)$$

Для его замыкания воспользуемся представлением для тока (6). Перегруппируя слагаемые суммы в выражении (29), получим

$$\sum_{g_*+1}^\infty I_g = n_1 K_{g_*}^+ + n_1 \sum_{g_*+1}^\infty K_g^+ \left( 1 - \frac{n_{g-1}^e}{n_g^e} \frac{K_{g-1}^+}{K_g^+} \right) n_g.$$

Полагая  $K_g^+ \simeq K_*^+ (g/g_*)^{2/3}$ ,  $K_{g-1}^+/K_g^+ \simeq 1 - 2/(3g)$  и  $n_{g-1}^e/n_g^e \simeq \exp(- (1 - (g_*/g)^{1/3}) \ln s)$ , сумму можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned} n_1 K_{g_*}^+ + n_1 K_*^+ \sum_{g_*+1}^\infty \left( \frac{g}{g_*} \right)^{2/3} \\ \times \left( 1 - \left( 1 - \frac{2}{3g} \right) \exp\left( \left( (g_*/g)^{1/3} - 1 \right) \ln s \right) \right) n_g. \end{aligned}$$

Дальнейшие преобразования этой суммы могут быть связаны с линеаризацией экспоненты при малых пересыщениях,  $\ln s \ll 1$ :  $\exp(((g_*/g)^{1/3} - 1) \ln s) \sim 1 + ((g_*/g)^{1/3} - 1) \ln s$ . В этом случае она может быть переписана в виде

$$n_1 K_{g_*}^+ + n_1 K_*^+ \sum_{g=g_*+1}^{\infty} \left(\frac{g}{g_*}\right)^{2/3} \left( (1 - (g_*/g)^{1/3}) \ln s + \frac{2}{3g} \right) n_g.$$

Введем дискретные аналоги выражений (13) для моментов функции распределения

$$\Omega_v = \sum_{g=g_*}^{\infty} g^{v/3} n_g \quad \text{или} \quad \tilde{\Omega}_v = \sum_{g=g_*}^{\infty} (g/g_*)^{v/3} n_g,$$

$$\Omega_v = g_*^{v/3} \tilde{\Omega}_v. \quad (30)$$

В результате как для доли конденсата, так и для  $\Omega$ -моментов получаем в точности те же уравнения, что и в континуальном подходе. Это означает, что вытекающее из диффузионного приближения описание поведения доли конденсата соответствует только малым пересыщениям, а система уравнений для моментов функции распределения принципиально не позволяет выйти за рамки линейного описания. Линейное приближение присуще всем имеющимся подходам к описанию доли конденсата, за исключением предложенного в работе [3]. Чтобы выйти за рамки этого ограничения, проведем процедуру приближенного суммирования ряда, полагая  $a \simeq 1 - \exp(-a)$ . Пренебрегая величинами порядка  $\Omega_{v-3}/\Omega_v$  и используя определение величины  $\alpha$ , введенной в (28), получим следующую замкнутую систему уравнений, описывающую эволюцию доли конденсата:

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{m_1}{\rho_\Sigma} \left[ D_* \left( n_{g_*}^{qs} + \tilde{\Omega}_2 \left( 1 - s^{(\tilde{\Omega}_1/\tilde{\Omega}_2 - 1)} \right) \right) + g_* \left( j_*^{qs} - n_{g_*}^{qs} \frac{dg_*}{dt} \right) \right], \quad (31)$$

$$\frac{d\tilde{\Omega}_2}{dt} + \tilde{\Omega}_2 \nabla \mathbf{u} = \frac{2}{3} \frac{D_*}{g_*} \left( n_{g_*}^{qs} + \tilde{\Omega}_1 \left( 1 - s^{(\tilde{\Omega}_0/\tilde{\Omega}_1 - 1)} \right) \right) + j_*^{qs} - \left( n_{g_*}^{qs} + \frac{2}{3} g_*^{-1} \tilde{\Omega}_2 \right) \frac{dg_*}{dt}, \quad (32)$$

$$\frac{d\tilde{\Omega}_1}{dt} + \tilde{\Omega}_1 \nabla \mathbf{u} = \frac{1}{3} \frac{D_*}{g_*} \left( n_{g_*}^{qs} + \tilde{\Omega}_0 \left( 1 - s^{(\tilde{\Omega}_{-1}/\tilde{\Omega}_0 - 1)} \right) \right) + j_*^{qs} - \left( n_{g_*}^{qs} + \frac{1}{3} g_*^{-1} \tilde{\Omega}_1 \right) \frac{dg_*}{dt}, \quad (33)$$

$$\frac{d\tilde{\Omega}_0}{dt} + \tilde{\Omega}_0 \nabla \mathbf{u} = j_*^{qs} - n_{g_*}^{qs} \frac{dg_*}{dt}, \quad (34)$$

$$\tilde{\Omega}_{-1} \tilde{\Omega}_1 = \tilde{\Omega}_0^2. \quad (35)$$

Получение этой системы завершает исследование по выводу уравнений, описывающих поведение доли конденсата в рамках непрерывного и дискретного подхода.

## Заключение

В работе получена система уравнений, описывающая эволюцию доли конденсата, и предложен ряд методов ее замыкания. Показано, что выделение конденсата как кластеров закритического размера согласуется не только с результатами анализа устойчивости кластеров, но и с характерными этапами процесса конденсации: закритические кластеры начинают формироваться на временах, больших кинетического. Это связано не с наличием различных времен релаксации, а с тем фактом, что время запаздывания формирования закритических кластеров больше кинетического. Предложены два варианта различной точности описания поведения доли конденсата. Первый из них получается при диффузионном описании процесса и соответствует линейному приближению, т. е. малым пересыщениям в системе. Исходя из дискретного описания удалось оценить точность полученных уравнений, получить уравнение диффузионного типа, применимого в широком диапазоне пересыщений, а также предложить замкнутую систему уравнений для определения доли конденсата, выходящую за рамки линейного приближения, присущего континуальному подходу.

## Список литературы

- [1] Hill P.G.J. // Fluid Mech. 1966. Vol. 25. Pt 3. P. 593–620.
- [2] Стернин Л.Е. Основы газодинамики двухфазных течений в соплах. М.: Машиностроение, 1974. 212 с.
- [3] Шнейдман В.А., Шубенко А.Л. // Изв. АН СССР. МЖГ. 1990. № 1. С. 108–116.
- [4] Колесниченко Е.Г. // Изв. АН СССР. МЖГ. 1981. № 3. С. 96–105.
- [5] van Kampen N.G. // Phys. Rep. 1985. Vol. 124. N 2. P. 69–160.
- [6] Горбачев Ю.Е., Никитин И.С. // ЖТФ. 2000. Т. 70. Вып. 12. С. 28–38.
- [7] Куни Ф.М. В сб.: Проблемы теоретической физики. III. Изд-во ЛГУ, 1988.
- [8] Kuni F.M. The Kinetics of the Condensation under the Dynamical Conditions. Preprint. N ITP-84-178 E. Kiev, 1984.
- [9] Becker R., Döring W. // Annalen der Physik. 1935. Vol. 24. P. 719–752.
- [10] Зельдович Я.Б. // ЖЭТФ. 1942. Вып. 11–12. С. 525–538.
- [11] Френкель Я.И. Собрание избранных трудов. Т. III. М.; Л.: АН СССР, 1959. С. 358–407.
- [12] Горбачев Ю.Е., Круглов В.Ю. // Письма в ЖТФ. 1990. Т. 16. Вып. 8. С. 1–4.
- [13] Gorbachev Yu.E. // Proc. of 20<sup>th</sup> Intern. Symp. Rarefied Gas Dynamics / Ed. Ching Shen. Beijing (China): Peking Univ. Press, 1997. P. 853–858.