

УДК 517.958+338.3+519.6

Имитационное моделирование системы газ-поршень при высоких степенях сжатия

М. А. Хайленко, О. В. Хайленко, Ю. К. Чернышев

Национальный аэрокосмический университет имени Н. Е. Жуковского «Харьковский авиационный институт», Украина

Приведены результаты имитационного моделирования распространения звука в сильно сжатом одноатомном газе, полученные применением дискретно-событийного представления поведения коллектива твёрдых сфер. Рассмотрена динамика выталкивания поршня в вакуум. Проведено исследование термодинамических параметров в процессе выталкивания подвижного тела сильно сжатым газом. Обнаружены эффекты пульсаций, обусловленные повышением скорости звука с повышением плотности. Дан численный метод задания возмущений без изменения полной энергии за счёт искусственного уменьшения энтропии.

Ключевые слова: *событийное моделирование, поправки к давлению, скорость звука, твёрдые сферы.*

Наведено результати імітаційного моделювання поширення звуку в сильно стислому одноатомну газі, отримані застосуванням дискретно-подієвого уявлення поведінки колективу твердих сфер. Розглянуто динаміку виштовхування поршня в вакуум. Проведено дослідження термодинамічних параметрів в процесі виштовхування рухомого тіла сильно стиснутим газом. Виявлені ефекти пульсацій, обумовлені підвищенням швидкості звуку з підвищенням щільності. Дан чисельний метод завдання збурень без зміни повної енергії за рахунок штучного зменшення ентропії.

Ключові слова: *подієве моделювання, поправки до тиску, швидкість звуку, тверді сфери.*

The results of the simulation of sound propagation in highly compressed monatomic gas are obtained using discrete-event behavior of the collective representation of hard spheres. The dynamics of pushing the piston in a vacuum was described. Research of thermodynamic parameters in the course of pushing out of a mobile body is conducted by strongly compressed gas was done. The effects of fluctuations caused by an increase in the speed of sound with increasing density was found. The numerical perturbation method of setting without changing the total energy due to an artificial reduction of the entropy was described.

Key words: *event simulation, the amendment to the pressure, the speed of sound, solid spheres.*

1. Введение

Скорость распространения v_{sound} малых возмущений в идеальном газе зависит лишь от температуры и вычисляется по формуле [1]:

$$v_{sound} = \sqrt{\frac{\gamma}{3}} v_{heat}, \quad (1)$$

где $\gamma = \frac{C_p}{C_v}$, v_{heat} – среднеквадратичная (тепловая) скорость молекул газа.

В свою очередь, $v_{heat} = \sqrt{\frac{3NkT}{\mu}}$, где k – постоянная Больцмана, T – температура в градусах Кельвина, $\mu = Nm_0$ – масса моля (в граммах), m_0 – масса одной молекулы, $N = 6 \cdot 10^{23}$ – число Авогадро. При изотермическом сжатии скорость звука, согласно (1), не изменяется. Однако в действительности это не так; значительную роль начинает играть степень заполненности рабочей области $\eta = \frac{V_0}{V}$, где V – объём газа, V_0 – суммарный объём молекул. В идеальном газе давление P_{th} зависит лишь от температуры и плотности: $P_{th} = n_r kT$, где n_r – количество молекул в 1 см^3 . Поправки к реальному давлению $\kappa_p = \frac{P_{th}}{P}$ и скорости звука при малых значениях параметра η могут быть получены путём использования уравнения Ван-дер-Ваальса. Но для плотностей, близких к плотностям жидкого состояния, «практическая ценность уравнения Ван-дер-Ваальса невелика» [1]. Таким образом, актуальной задачей является вычисление поправок при высоких степенях сжатия и их учёт при решении задач типа вычисления скорости звука, динамики выталкивания поршня. Наиболее полно математическая теория поправок для газа упругих сфер при больших значениях коэффициента заполнения рассмотрена в работе [2]. Однако полученные в ней результаты недостаточны.

2. Метод твёрдых сфер

С появлением ЭВМ первый успех в рассматриваемой теме был достигнут в [3] путём имитационного моделирования, сводящегося к замене реальных молекул твёрдыми сферами и использованию законов механики при расчёте траекторий. Повышение вычислительных мощностей и развитие специальных алгоритмических методов дало возможность составить таблицы поправок κ_p к давлению и κ_λ к длине свободного пробега [4], графически представленных на рис. 1. Если давление в нормальных условиях равно P_{th} , то в случае значительного сжатия для вычисления истинного давления P вносится поправка к теоретическому значению:

$$P = \frac{P_{th}}{\kappa_p(\eta)}. \quad (2)$$

При столкновении двух упругих сфер массами m_1 , m_2 и радиусами R_1 , R_2 со скоростями \vec{v}_1 , \vec{v}_2 и центрами (в момент столкновения) \vec{r}_1 и \vec{r}_2 новые скорости \vec{v}'_1 , \vec{v}'_2 рассчитываются по формулам, связанным с выполнением законов сохранения суммарных энергии, импульса и момента импульса [5]:

$$\vec{v}'_1 = \vec{v}_1 + \frac{2M(\Delta\vec{v}, \vec{n})}{m_1} \vec{n}, \quad \vec{v}'_2 = \vec{v}_2 - \frac{2M(\Delta\vec{v}, \vec{n})}{m_2} \vec{n}, \quad (3)$$

где $\Delta \vec{v} = \vec{v}_2 - \vec{v}_1$, $\vec{n} = \frac{\vec{r}_2 - \vec{r}_1}{R_2 + R_1}$, $M = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}$ – приведенная масса.

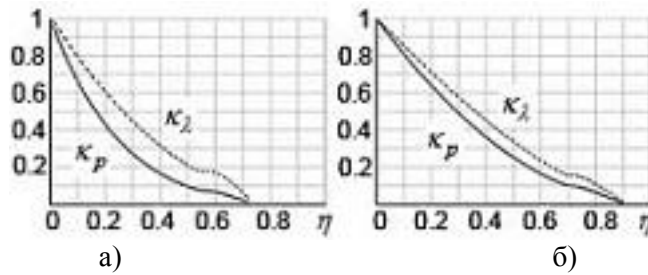


Рис.1. Зависимости поправочных коэффициентов $\kappa_p = \frac{P_{th}}{P}$ и $\kappa_\lambda = \frac{l}{l_{th}}$

от степени заполненности в случае трёхмерного (а) и двумерного (б) пространств

Для обеспечения максимальной скорости поиска ближайших по времени событий-столкновений используется декомпозиция рабочей области путём разбиения её на кубические ячейки [4, 5] и составления динамической очереди для всей совокупности модельных частиц.

3. Расчётная схема системы газ-поршень

Рабочая область представлена цепочкой n_{cells} кубических ячеек с единичными рёбрами. Общие грани двух ячеек считаются проницаемыми, а внешние – отражающими. Помимо этого, рассматривается подвижная стенка с заданным расположением X_{body} по оси цепочки ячеек, моделирующая границу тела (поршня) массы m_{body} . Рабочая область, задаваемая неравенством $1 \leq x < X_{body} \leq n_{cell}$, изначально хаотически заполнена n модельными сферами единичной массы и радиуса R , каждой из которых приписана случайная скорость \vec{v}_i единичной длины с равномерным угловым распределением. Считая аргон наиболее близким по своим физическим свойствам газу из твёрдых сфер и учитывая, что степень заполненности аргона при нормальных температурных условиях составляет примерно 10^{-3} , получаем приближенную формулу для давления:

$$P_{th} = 14.65 \frac{\eta}{\mu} T \text{ МПа.} \quad (4)$$

В среднем в одной ячейке содержится $n/(X_{body}-1)$ модельных частиц. Значение параметра заполнения оценивается как $\eta = V_{part}/V_{all}$, где $V_{part} = (4\pi R^3/3)n$, $V_{all} = (X_{body}-1+2R)(1+2R)^2$.

Развитие картины взаимодействия модельных частиц после реализации 10-15 (в среднем) упругих парных столкновений для каждой модельной частицы приводит к «максвеллизации», [6], т.е. к установлению распределения

Максвелла с единичной средней квадратичной скоростью и средней энергией, равной 0.5. Давление, оказываемое одной модельной частицей на стенки ячейки в этих условиях, равняется $\frac{1}{3}$ условных единиц, а температура равна

$$T_{\text{simul}} = \frac{1}{3} [4].$$

Преобразование скоростей при столкновении модельной частицы с массой m и скоростью \vec{v} ($v_x > 0$) с поршнем, обладающим скоростью V_{body} , коллинеарной оси абсцисс, производится по законам упругого отражения:

$$\begin{aligned} v'_x &= (2M_{\text{body}}V_{\text{body}} + (m - m_{\text{body}})v_x) / (m + m_{\text{body}}), \\ V'_{\text{body}} &= (2mv_x - (m - m_{\text{body}})V_{\text{body}}) / (m + m_{\text{body}}). \end{aligned} \quad (5)$$

Графическое дифференцирование сглаженной зависимости V_{body} от времени приводит к зависимости ускорения от времени, а следовательно, и к зависимости от времени силы давления модельного газа на подвижную стенку. Общая длина цепочки в количестве $n_{\text{cells}} = 10000$ сопоставляется 1 м, модельной тепловой скорости в одну условную единицу сопоставляется реальная тепловая скорость 500 м/с, для разреженного газа с $\eta = 0.001$ давлению на стенку тела сопоставим величину, вычисленную по формуле (4). Эти значения близки к соответствующим величинам для аргона при нормальных условиях. После максвеллизации средняя скорость звука в системе модельных частиц одноатомного становится равной, согласно формуле (1), $v_{\text{sound}} = \sqrt{\frac{5}{9}} = 0.7454$ условных единиц, что соответствует 372,7 м/с.

Рассматриваемая расчётная схема позволяет задавать начальные возмущения таким образом, что уменьшение энтропии сопровождается постоянством полной энергии газа. Векторам скоростей модельных частиц в ячейкам с номерами от 1 до $n_{\text{sound}} \approx 100$ придаётся направление вдоль оси OX без изменения их длин. Это и вносит возмущение, распространяющееся в дальнейшем по оси OX, причём полная энергия не изменяется, а энтропия, как показатель упорядоченности, – уменьшается. В [4, 7] рассмотрено распространения волны суммарного импульса. Скорость звука отождествляется со скоростью перемещения нулевой точки фронта, отделяющей область положительных значений абсциссы импульса от области отрицательных.

Для решения задач типа моделирования выталкивания свободного поршня из трубы или развития детонационной волны предлагается скорость распространения возмущений определять, исходя из интервалов времени между столкновениями фронта с подвижным телом. На рис. 2 отображены последовательности таких отражений при массе $M_{\text{body}} = 10^6$, $n_{\text{sound}} = 100$, $X_{\text{body}} = 2000$. Значение массы подвижного тела в таком случае на несколько порядков больше, чем масса газа, что соответствует очень малым скоростям выталкиваемого тела, т.е. практически неизменному объёму газа. Считая

теплову скорость равной 500 м/с и учитывая отражения, начиная с третьего, приходим к значениям скорости звука.

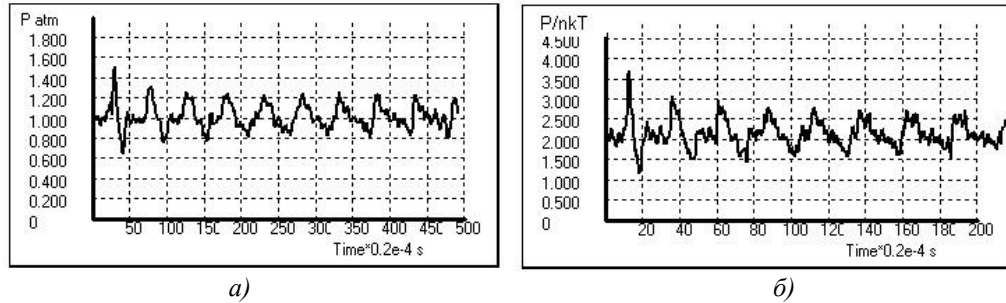


Рис.2. Отражения фронта малых возмущений в газе при различных параметрах заполненности: а) $\eta_a = 0.001$, $\kappa_a = 0.996$; б) $\eta_b = 0.171$, $\kappa_b = 0.49$

В случае а) газ является разреженным, $\eta_a = 0.001$, $\kappa_a = 0.996$, давление при отсутствии возмущений $p_a = 0.1004$ МПа и $v_{\text{sound}(a)} = 375 \pm 5$ м/с, что практически совпадает с теоретически вычисленной скоростью звука 372.7 м/с. В случае б) $\eta_b = 0.171$, $\kappa_b = 0.49$ (согласно рис. 1, а), $p_b = 2.03 p_{\text{th}}$ и $v_{\text{sound}(b)} = 758 \pm 5$ м/с. Заметим, что в случае б) $p_{\text{th}} \approx 17.1$ МПа, а давление с учётом поправок $p_b \approx 35$ МПа. Отношение скоростей звука оказывается обратным к отношению поправок к давлению (рис. 3) :

$$v_{\text{sound}(b)} / v_{\text{sound}(a)} = \kappa_a / \kappa_b . \quad (6)$$

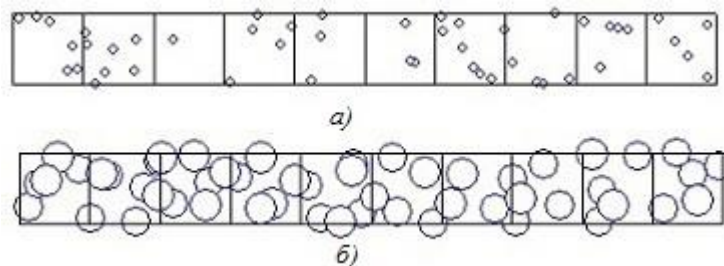


Рис.3. Сравнение заполненностей части ячеек рабочей области: а) $\eta_a = 0.001$, $\kappa_a = 0.996$; б) $\eta_b = 0.171$, $\kappa_b = 0.49$

Давление и скорость звука в случае б) приблизительно в два раза больше теоретических, чем в случае а), что и является результатом учёта поправок к формуле (1) для скорости звука в разреженном газе.

Помимо приведенного примера, соотношение (6) проверено для широкого диапазона коэффициентов заполнения. Интервал $0.1 < \eta < 0.55$ соответствует состоянию сильно сжатого модельного газа, $0.55 < \eta < 0.57$ – жидкости из твёрдых сфер, $0.57 < \eta < 0.74$ – твёрдого плотноупакованного тела.

4. Выталкивание подвижного тела

Рассмотрим тот случай, когда масса подвижного тела сравнима с массой газа; например, $m_{\text{body}} = M_{\text{body}} n = 10000$ при $M_{\text{body}} = 1$. На рис. 4 приведен результат выталкивания в вакуум такого подвижного тела; его масса принята равной массе газа. Начальное положение подвижной стенки задано её координатой $X_{\text{body}} = 2000$ усл.ед., т.е. 0.2 м; для разреженного модельного газа, близкого по свойствам к идеальному, $P_{\text{th}} \approx 0.1$ МПа.

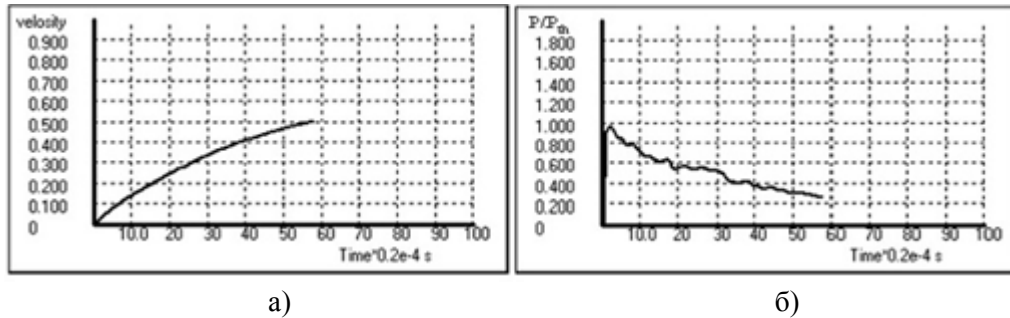


Рис.4. Выталкивание подвижного тела массы, равной массе газа; газ разреженный: а) график скорости тела; б) зависимость давления на поршень от времени.

Дополнительная информация о состоянии газа в рабочей области приведена на графиках рис. 5.

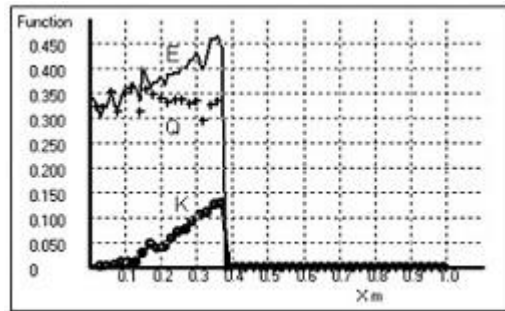


Рис.5. Распределение термодинамических параметров для одной частицы

Рабочая область разбивается на 100 равных отрезков Δ_i , $i = 1..100$, на каждом из которых в отдельные моменты времени подсчитывается суммарные

масса $massa_i = \sum_{x_k \in \Delta_i}^{n_i} m_k$, энергия $E_i = \sum_{x_k \in \Delta_i}^{n_i} \frac{m_k \vec{v}_k^2}{2}$, импульс $\vec{P}_i = \sum_{x_k \in \Delta_i}^{n_i} m_k \vec{v}_k$,

кинетическая энергия слоя $K_i = \frac{\vec{P}_i^2}{2massa_i}$ и тепловая энергия слоя $Q_i = E_i - K_i$,

после чего вычисляются эти же величины, приходящиеся на одну частицу путём деления на количество n_i частиц в слое. Между отдельными моментами

измерений происходит 10^6 событий; общее количество событий в данном случае равно примерно 85 миллионов.

Энергия газа передаётся подвижному телу, в результате чего для рассматриваемого момента времени отношение энергии тела к полной энергии газа равняется 0.34, температура газ снижается до 0.75 от исходной.

Рассмотрим аналогичный процесс выталкивания подвижного тела сильно сжатым газом. Согласно результатам п.3, скорость звука в плотном газе может значительно превышать скорость звука в разреженном газе. Это значит, что на динамику продвижения тела могут влиять отражения звуковой волны. На рис. 6, а) воспроизведено заполнение единичных кубических ячеек центрами твёрдых сфер радиусом $R = 0.37$, так что $\eta = 0.49$, $\kappa_p(0.49) = 0.108$.

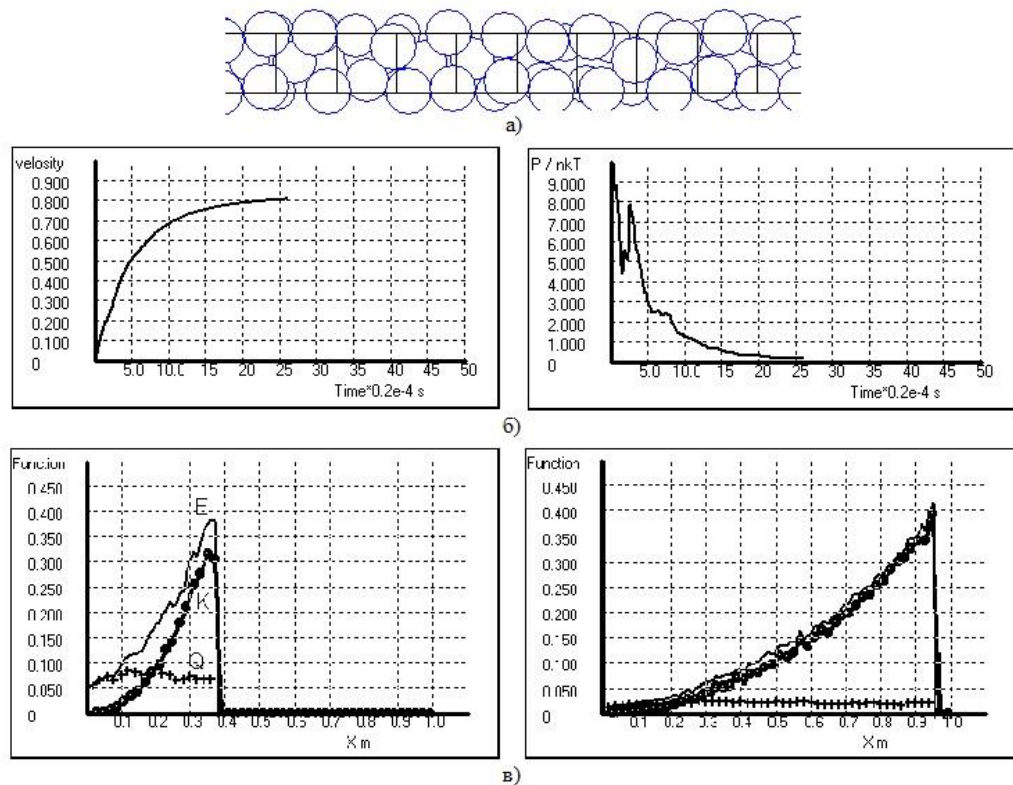


Рис.6. Выталкивание подвижного тела сильно сжатым газом: а) заполнение единичных ячеек центрами твёрдых сфер при $\eta = 0.49$; б) изменение скорости тела и давления на стенку со временем; в) преобразование тепловой энергии газа в кинетическую

5. Выводы

Сравнительный анализ результатов, приведенных на графиках рис. 4, 5, 6, показывает следующее:

– график зависимости давления на поршень от его скорости при высоком уровне заполнения содержит участки резкой неравномерности, что можно объяснить распространением звуковой волны и её отражениями;

– к.п.д. процесса передачи телу энергии сжатого газа значительно выше; для данного примера при выходе тела из рабочей области отношение энергии тела к начальной энергии газа равно примерно 0.64, а скорость можно оценить как 400 м/с;

– температура газа в каждый момент времени при выталкивании свободного поршня в вакуум примерно постоянна по длине рабочей области;

– в случае значительной заполненности практически вся начальная тепловая энергия молекул газа переходит в кинетическую с резким снижением тепловой (а значит, с резким снижением температуры).

В целом событийный подход к имитационному моделированию поведения газа позволяет достаточно адекватно описывать особые случаи поведения газа в процессе динамического взаимодействия с подвижными телами, испытывающими давление. Кроме того, становится возможным численное исследование описанных процессов с учётом энерговыделения при локальных взаимодействиях модельных частиц [8].

ЛИТЕРАТУРА

1. Телеснин Р. В. Молекулярная физика. – М.: Высш. шк., 1965. – 298 с.
2. Черчиньяни К. Теория и приложения уравнения Больцмана. – М.: Мир, 1978. – 496 с.
3. Alder B. J., Wainwright T. Molecular dynamics by electronic computers. // Proceedings of the International Symposium on Transport Processes in Statistical Mechanics. – New York : Interscience, 1958. – P.97.
4. Чернышев Ю. К. Методы вычисления статистических параметров в событийном моделировании. – Х.: «Фактор», 2014. – 244 с.
5. Чернышев Ю. К. Решение задач имитационного моделирования поведения большого количества модельных частиц – Х.: ХАИ, 2006. – 58с.
6. Prigogine I., Stengers I. Order out of chaos. Man's new dialogue with nature. – London, 1984. – 430 P.
7. Чернышев Ю. К. Событийное программирование. Применение к решению некоторых задач физики – Х.: ХАИ, 2008. – 60 с.
8. Хайленко О. В., Чернышев Ю. К. Оптимизация процесса расчета параметров детонационной волны. // Авиационно-космическая техника и технология. – Харьков, ХАИ, 2015. – № 1/118. – С. 68-73.