

МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ СКОРОСТИ ЗВУКА ВОДОРОДА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ В СЛУЧАЕ ПЕРЕХОДА ИЗ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ФАЗЫ В АТОМАРНУЮ

MATHEMATICAL ANALYSIS OF THE SPEED OF SOUND OF HYDROGEN FOR THE EQUATION OF STATE IN THE CASE OF TRANSITION FROM MOLECULAR PHASE TO ATOMIC

S. Yagupov
A. Mezentsev

Summary. The problems of mathematical modeling of sound velocity for isentropic compression of hydrogen with a real equation of state [9] to high density are considered. At these density values, a certain anomaly is observed in the behavior of the isentrope, which is associated [9] with the hydrogen transition of their molecular phase to the atomic one. On this interval of change of the density of hydrogen does not satisfy the properties of the normal gas. The speed of sound for the real equation of state of hydrogen [9] at high pressure values is approximated by different analytical dependences, including on different parts of the density change. Errors of these approximations are established. The resulting approximations can be used for subsequent mathematical modeling at high degrees of hydrogen compression.

Keywords: The real equation is the state of hydrogen, compression to high density, approximation by analytic functions, the speed of sound.

Ягунов Станислав Александрович

К.ф.-м.н., Уральский государственный университет
путей сообщения
Sya_s@mail.ru

Мезенцев Алексей Владимирович

К.ф.-м.н., Уральский государственный университет
путей сообщения
amezentsev@usurt.ru

Аннотация. Рассматриваются вопросы математического моделирования скорости звука для изэнтропического сжатия водорода с реальным уравнением состояния [9] до больших степеней плотности. При этих значениях плотности в поведении изэнтропов наблюдается определенная аномалия, которую связывают [9] с переходом водорода их молекулярной фазы в атомарную. На данном промежутке изменения плотности водород не удовлетворяет свойствам нормального газа. Скорость звука для реального уравнения состояния водорода [9] при больших значениях давления аппроксимирована разными аналитическими зависимостями, в том числе на разных участках изменения плотности. Установлены погрешности этих аппроксимаций. Полученные аппроксимации можно использовать для последующего математического моделирования при больших степенях сжатия водорода.

Ключевые слова: Реальное уравнение состояние водорода, сжатие до больших значений плотности, аппроксимация аналитическими функциями, скорость звука.

Исследование явлений неограниченной кумуляции энергии актуально в связи с различными приложениями в науке и технике. Одной из задач, связанных с эффектом неограниченной кумуляции, является управляемый термоядерный лазерный синтез, описанный, например, в книге Е. И. Забабахина, И. Е. Забабахина [4]. При термоядерном лазерном синтезе для инициирования термоядерных процессов необходимо получить очень большие значения плотности и температуры. С точки зрения минимизации энергетических затрат для достижения требуемых значений параметров наибольший интерес представляют режимы, при которых осуществляется безударное сжатие вещества. Кроме того, именно режимы безударного сильного сжатия позволяют получить большие значения плотности газа.

Решение задачи безударного сильного сжатия невозможно без математического моделирования. В качестве математической модели, достаточно адекватно описы-

вающей процессы сжатия, часто используется модель идеального газа.

Ниже строятся такие решения системы уравнения газовой динамики для политропного газа

$$\begin{cases} \sigma_t + \vec{V} \cdot \nabla \sigma + \frac{(\gamma - 1)}{2} \sigma \cdot \operatorname{div} \vec{V} = 0, \\ \vec{V}_t + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} + \frac{2}{(\gamma - 1)} \sigma \cdot s^2 \nabla \sigma + \frac{2}{\gamma} \sigma^2 s \nabla s = \vec{0}, \\ s_t + \vec{V} \nabla s = 0, \end{cases} \quad (1)$$

которые описывают процессы безударного сильного сжатия газа. В системе (1) $\sigma = \rho^{(\gamma-1)/2}$; ρ — плотность; γ — константа в уравнении состояния $p = A^2(S)\rho^\gamma / \gamma$, $\gamma > 1$; p — давление; S — энтропия; $s = A(S)$; $\vec{V} = (u, v, w)$ — скорость газа; $\nabla = (\partial / \partial x_1, \partial / \partial x_2, \partial / \partial x_3)$ — оператор градиента; точкой помечено скалярное произведение; t , x_1 , x_2 ,

x_3 — независимые переменные, обозначающие соответственно время и декартовы координаты точки из R^3 ; $\vec{U} = (\sigma, u, v, w, s)$ — искомые функции. При этом c — скорость звука газа задается соотношением $c = s\sigma^l$.

Математическое моделирование безударного сильного сжатия газа ведется в различных направлениях.

Первое направление математического моделирования безударного сильного сжатия газа (первоначально однородного и покоящегося газа) состоит в использовании точных решений систем уравнений газовой динамики для политропного газа.

Е.И. Забабахиным, Е.И. Забабахиным [4] указано, что впервые простая центрированная волна Римана применена Гюонио в 1889 г. [13] и Рэлеем в 1910 г. [14] к описанию безударного сильного сжатия плоского слоя газа. Подробное описание безударного сжатия до бесконечной плоскости плоского слоя первоначально однородного и покоящегося газа имеется в книге К.П. Станюковича [11]. А.Ф. Сидоровым [15] имеющийся при построении не автомодельной простой волны Римана произвол в одну функцию одной переменной, использован для описания сжатия плоского слоя, в котором бесконечное значение плотности достигается только в одной точке. Интерпретации этих решений для задач о безударном сильном сжатии газа посвящены работы Я.М. Каждана [7], И.Е. Забабахина, В.А. Симоненко [5], А.Н. Крайко, Н.И. Тилляевой [8].

Другое направление математического моделирования безударного сильного сжатия газа связано с приближенными: аналитическими, численными или комбинированными численно-аналитическими методами. Например, Г.В. Долголевой, А.В. Забродиным [6] рассмотрены решения уравнений газодинамики, реализующие неограниченное по плотности безударное сжатие в плоском, цилиндрическом и сферическом случаях и показано, что в рамках оболочечной системы можно подобрать такой закон энергосвождения, который позволяет воспроизвести зависимости скорости и давления на внешней границе сжимаемого слоя, необходимые для осуществления безударного сжатия в смеси дейтерий-третий.

В монографии С.П. Баутина [1] предложен единый подход к математическому моделированию безударного сильного сжатия газа. Данный подход состоит в следующем. Сначала для системы уравнений газовой динамики ставятся начально-краевые задачи, описывающие процесс безударного сильного сжатия произвольного, локально аналитического, фонового течения на произвольной, локально аналитической поверхности. Для поставленных начально-краевых задач доказываются теоремы существования и единственности аналитических и кусочно-аналитических решений. При этом одним из элементов составного решения обязательно является обобщение простой центрированной волны Римана. Если это обобщение центрированной волны стыкуется через слабый разрыв только с фоновым течением, то таким образом описывается сжатие газа до бесконечной плотности. Сжатие газа до любой наперед заданной конечной плотности описывается при состыковке обобщенной центрированной волны: с одной стороны, через слабый разрыв с фоновым течением, а с другой — через второй слабый разрыв с течением, имеющим наперед заданное нужное распределение плотности. Решения рассматриваемых задач представляется в виде бесконечных рядов с коэффициентами, рекуррентно определяемыми в явном виде или через квадратуры. Исследуются свойства решений, в том числе, устанавливаются асимптотические законы поведения газодинамических параметров при неограниченном росте плотности. Этот подход получил дальнейшее развитие как в работах С.П. Баутина [2], так и в работах его учеников.

Исследование реальных уравнений состояния и учет влияния дополнительных физических эффектов являются наиболее актуальными и востребованными практикой направлениями исследования процессов безударного сильного сжатия газа (см. [10, с. 467], [1, с. 139]), полученных в соответствующих, как правило, очень сложных физических экспериментах, в которых исследуются термодинамические свойства заданных реальных сред.

Рассматривается система уравнений газовой динамики с произвольным уравнением состояния. Уравнение состояния может быть представлено в разных видах. Например, если уравнение состояния представлено в виде $p = p(\rho, e)$, то система уравнений газовой динамики для одномерных течений имеет вид

$$\begin{cases} \rho_t + u\rho_r + \rho(u_r + \vartheta \frac{u}{r}) = 0, \\ u_t + uu_r + \frac{1}{\rho} p_r = 0, \\ e_t + ue_r + \frac{p}{\rho}(u_r + \vartheta \frac{u}{r}) = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь:

$$r = \sqrt{\sum_{i=1}^{g+1} x_i^2} \geq 0, \vartheta = 0, 1, 2, \rho —$$

плотность, u — скорость, p — давление, e — внутренняя энергия, t — время.

В работе [9] в виде графика (см. рис. 1) приведена зависимость давления p и от плотности ρ , описывающая

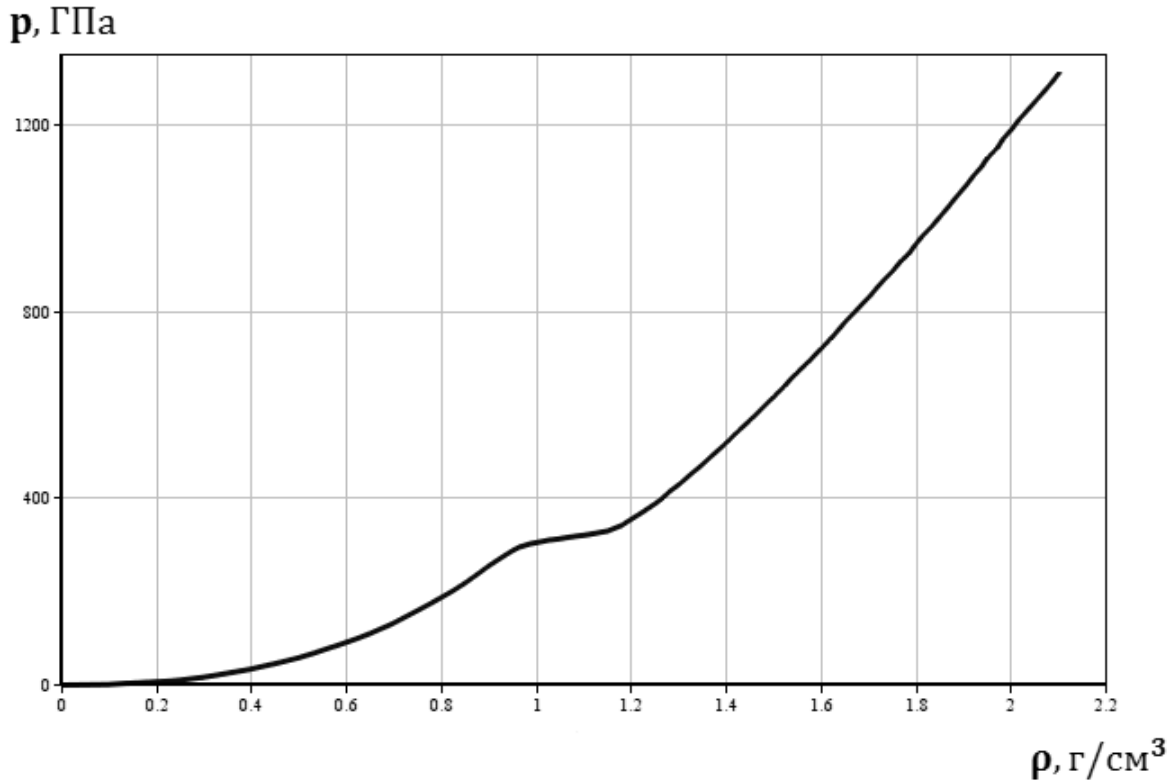


Рис. 1. График изэнтропы водорода (исходные данные)

изэнтропическое сжатие водорода до очень больших значений давления и плотности. Единицы измерения на (рис. 1): вдоль оси абсцисс — $г/см^3$ вдоль оси ординат — ГПа. В диапазоне изменения плотности $0,9 — г/см^3$ скорость нарастания давления от 260 ГПа до 380 ГПа существенно меняется. Такая аномалия в поведении давления связывается [9] с переходом водорода при этих условиях из молекулярного состояния в атомарное.

Для математического исследования зависимости давления от плотности, полученной в результате физических экспериментов, представленной на графике (рис. 1) удобно представлять данную зависимость аналитическими функциями [12]. Такие аналитические функции найдены в виде рациональных дробей [3] и полиномов разных старших степеней [12]. Также проанализирована погрешность, с которой зависимость давления от плотности (рис. 1) аппроксимируется найденными аналитическими функциями.

В данной работе рассмотрим вопрос аналитического приближения скорости звука

$$\frac{\partial p}{\partial \rho} = c^2.$$

Изучение и анализ скорости звука в газовой динамике представляется важным. Скорость звука — это ско-

рость распространения малых возмущений, а в среде, где степень сжатия большая, возмущения могут быть очень маленькие, но они гуляют с разными скоростями, что приводит к созданию фона. Аналитическое приближение скорости звука рассмотрим, как на полном участке изменения плотности в отрезке $[0,2.1] г/см^3$, так и на среднем участке изменения плотности $[0.5,1.5] г/см^3$. Зависимость давления от плотности, представленной на графике (рис. 1)

Проведем анализ скорости звука на полном интервале. В работе [12] для зависимости давления от плотности (рис.1) в интервале изменения плотности $(0,2.1) г/см^3$ выполнена аппроксимация с помощью полинома 15 степени с хорошей относительной погрешностью. Эта аппроксимация задается функцией

$$p(\rho) = \sum_{k=0}^5 a_k \rho^k,$$

где коэффициенты принимают следующие значения

$$\begin{aligned} a_0 &= -0,0622107, a_1 = -518,496256, \\ a_2 &= 13023,477609, a_3 = -123965,859, \\ a_4 &= 618449,144473, a_5 = -1786826,42437, \\ a_6 &= 3150504,10151, a_7 = -3410169,47311, \\ a_8 &= 2145703,55086, a_9 = -626796,911108, \\ a_{10} &= -257,8081593, a_{11} = -31814,512088, a_{12} = \end{aligned}$$

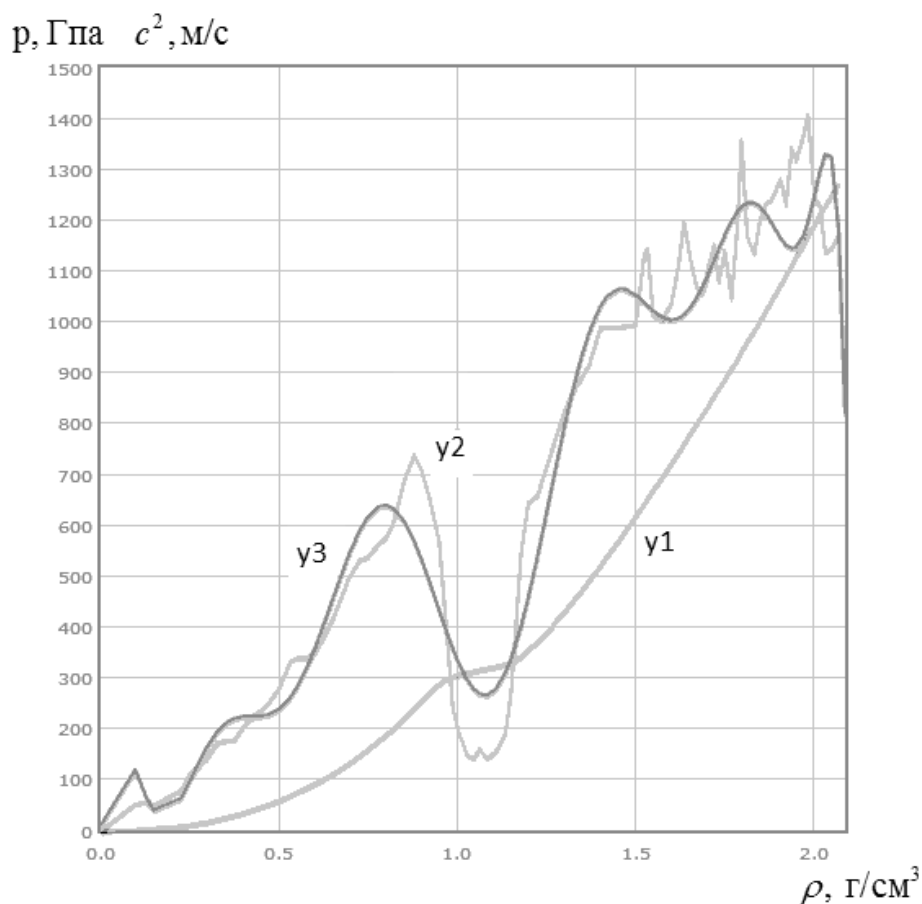


Рис. 2. Сравнительный график исходной функции (y1), производной функции заданной таблицей (y2) и производной полинома 15 степени (y3)

$$96649,564, a_{13} = -56383,5349594, \\ a_{14} = 14040,262236, a_{15} = -1339,226833$$

Далее рассчитаем производные табличной функции и функции которая аппроксимирует зависимость давления от плотности на всем интервале изменения плотности.

Производная функции заданной таблично вычислена по методу Лагранжа (метод по трем точкам):

$$P(x) = \frac{2x - x_1 - x_2}{(x_0 - x_1)(x_0 - x_2)} y_0 + \frac{2x - x_0 - x_2}{(x_1 - x_0)(x_1 - x_2)} y_1 + \\ + \frac{2x - x_0 - x_1}{(x_2 - x_0)(x_2 - x_1)} y_2$$

Производная полинома степени 15 имеет вид

$$p(\rho) = \sum_{k=1}^{15} a_k \rho^{k-1},$$

где коэффициенты принимают следующие значения

$$a_1 = -518,496256, a_2 = 26046,955218, \\ a_3 = -371897,577, a_4 = 2473796,57789, \\ a_5 = -8934132,12185, a_6 = 18903024,60906, \\ a_7 = -23871186,31177, a_8 = 17165628,40688, \\ a_9 = -5641172,199972, a_{10} = -2578,081593, \\ a_{11} = -349959,632968, a_{12} = 1159794,768, \\ a_{13} = -732985,9544722, a_{14} = 196563,671304, \\ a_{15} = -20088,402495$$

Сравнительный график исходной функции и производных представлен на рис. 2

Далее проведем анализ скорости звука на среднем интервале. В работе [12] для зависимости давления от плотности (рис. 1) в интервале изменения плотности $(0.5, 1.5) \text{ г/см}^3$ выполнена аппроксимация с помощью полинома 15 степени с хорошей относительной погрешностью. Эта аппроксимация задается функцией

$$p(\rho) = \sum_{k=0}^5 a_k \rho^k,$$

где коэффициенты принимают следующие значения

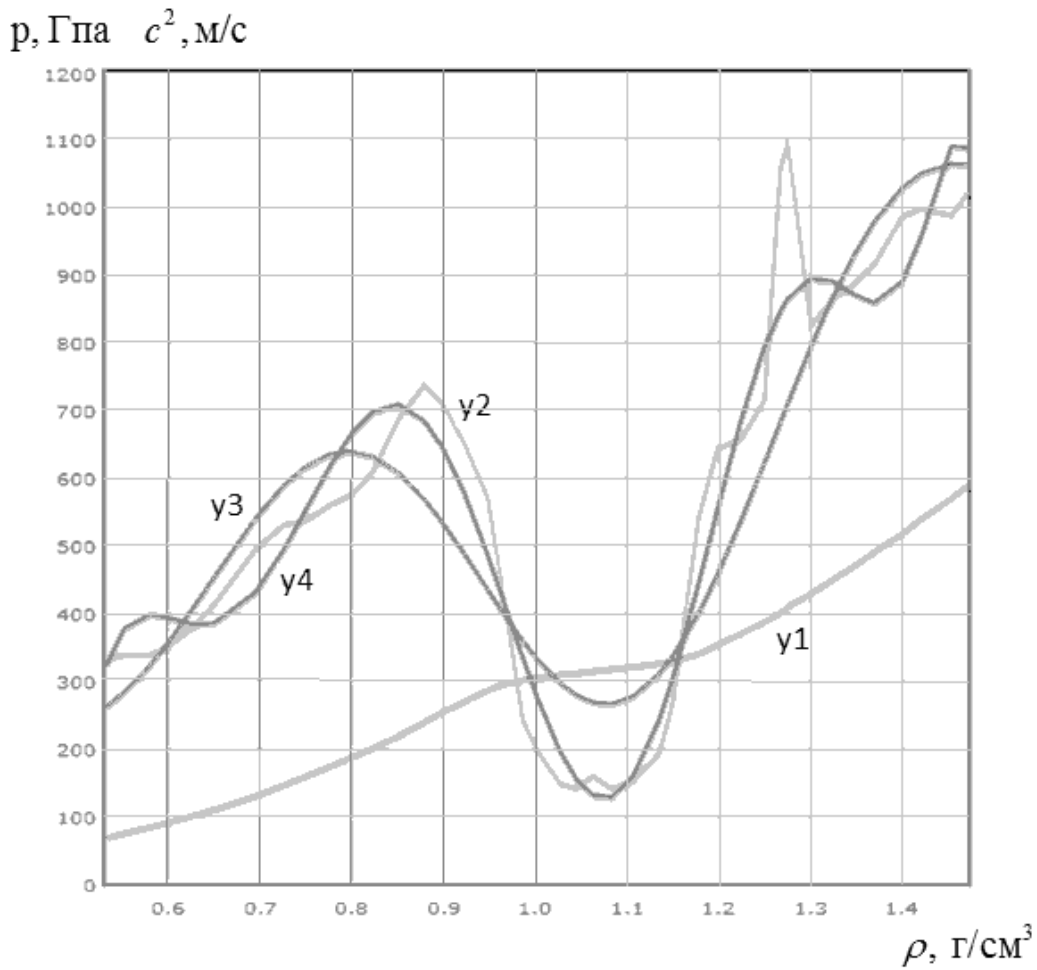


Рис. 3. Сравнительный график исходной функции (y1)
 Производной функции заданной таблицей (y2)
 Производной полинома 15 степени для полного графика (y3)
 Производной полинома 15 степени для среднего графика (y4)

$a_0 = 17253,10614, a_1 = -120684,1509,$
 $a_2 = 295906,8501, a_3 = -222406,8021,$
 $a_4 = -205727,162039, a_5 = 330663,3291,$
 $a_6 = 54501,934, a_7 = -140133,6631,$
 $a_8 = -118981,632392, a_9 = 76691,2753,$
 $a_{10} = 66660,798, a_{11} = -44,980268,$
 $a_{12} = -37334,06423, a_{13} = -14615,06423,$
 $a_{14} = 24606,6137, a_{15} = -6151,477$

Далее рассчитаем производные табличной функции и функции, которая аппроксимирует зависимость давления от плотности на среднем интервале изменения плотности (0.5,1.5).

Производная полинома степени 15 имеет вид

$$p(\rho) = \sum_{k=1}^{15} a_k \rho^{k-1},$$

где коэффициенты принимают следующие значения

$a_1 = -120684,1509, a_2 = 591813,7,$
 $a_3 = -667220,4065, a_4 = -822908,648,$
 $a_5 = 1653316,645, a_6 = 327011,605,$
 $a_7 = -980935,642, a_8 = -951853,059,$
 $a_9 = 690221,477, a_{10} = 666607,980,$
 $a_{11} = -494,782, a_{12} = -446808,77,$
 $a_{13} = -190002,366, a_{14} = 344492,592,$
 $a_{15} = -92272,168$

Сравнительный график исходной функции и производных представлен на рис. 3 (средний график)

Анализируя графики на рис. 2, рис. 3 можно сделать вывод, что приближение на среднем участке (в интервале изменения плотности (0.5,1.5)) хорошее, на рис. 2, рис. 3., вне этого интервала наблюдается большая погрешность.

ЛИТЕРАТУРА

1. Баутин С. П. Математическая теория безударного сильного сжатия идеального газа. — Новосибирск: Наука, 2007. — 312 с.
2. Баутин С. П. Безударное сверхсжатие идеального газа. // Вычислительные технологии. 1998. — Т. 3, № 6. — С. 3–8.
3. Баутин С. П., Ягунов С. А. Математическое исследование безударного сжатия водорода с реальным уравнением состояния // Вычислительные технологии. — 2001. — Т. 6 — С. 103–107.
4. Забабахин Е. И. Забабахин И. Е. Явления неограниченной кумуляции. М.: Наука, 1988. — 172 с.
5. Забабахин И. Е., Симоненко В. А. Сферическая центрированная волна сжатия // Прикладная математика и механика. 1978. Т. 42, вып. 3. — С. 573–576.
6. Долголева Г. В., Забродин А. В. Разработка темоядерных мишеней на основе реализации концепции безударного сжатия // Аэромеханика и газовая динамика. 2002, № 2. — С. 48–54.
7. Каждан Я. М. К вопросу об адиабатическом сжатии газа под действием сферического поршня // Журнал прикладной механики и технической физики. — 1977. — № 1. — С. 23–30.
8. Крайко А. Н., Тилляева Н. И. Автомодельное сжатие идеального газа плоским, цилиндрическим или сферическим поршнем // Теплофизика высоких температур. — 1998. Т. 36, № 1. С. 120–128.
9. Копышев В. П., Урлин В. Д. Изэнтропическая сжимаемость водорода и уравнения состояния водорода до давления 1ТПа // Ударные волны и экстремальные состояния вещества. Под ред. В. Е. Фортова и др. М.: Наука — 2000. — С. 297–314.
10. Сидоров А. Ф. Избранные труды: математика. Механика. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. — 576 с.
11. Станюкевич К. П. Неуставившиеся движения сплошной среды. М.: Гос. изд-во техн.-теор. лит-ры. — 1955. — 804 с.
12. Ягунов С. А. Аппроксимация реального уравнения состояния водорода при больших степенях сжатия, полученного в физических экспериментах // Современная наука: актуальные проблемы теории и практики: Серия «Естественные и технические науки». — 2016. — № 4. — С. 58–63.
13. Hugoniot P. H. Sur la propagation du mouvement dans les corps et spécialement dans les gas parfaits, II // Journal de l'Ecole Polytechnique. — 1889. — № 5. — P. 1–125.
14. Lord Rayleigh (Strutt J. W.) Aerial plane of finite amplitude // Proceedings of the Royal Society of London. 1910. — Vol. 84. — P. 247–284.
15. Sidorov A. F. Mathematical modeling of the processes of unshocked gas compression // Rus. J. Numer. Anal. and Math. Modelling. — 1995. — Vol. 10, № 3. P. 255–277.

© Ягунов Станислав Александрович (Sya_s@mail.ru), Мезенцев Алексей Владимирович (amezentsev@usurt.ru).

Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»



Уральский государственный университет путей сообщения