



RÓWNANIA STANU OŚRODKÓW PŁYNNYCH
W AKUSTYCE NIELINIOWEJ

Equations of State for Fluid Media in Nonlinear Acoustics

Magdalena Kuśmirek-Ochrymiuk, Sergey Leble

Katedra Fizyki Teoretycznej i Metod Matematycznych
Wydział Fizyki Technicznej i Matematyki Stosowanej Politechniki Gdańskiej
ochrymiuk@mif.pg.gda.pl

STRESZCZENIE

Artykuł przedstawia analizę termodynamicznych równań stanu pewnych ośrodków płynnych i ich zastosowanie w akustyce nieliniowej do teoretycznego wyznaczania takich wielkości akustycznych jak prędkość dźwięku i współczynniki B/A , C/A . W artykule podano ogólne wyrażenia dla tych wielkości, jako funkcje gęstości i temperatury. Sposób uzyskania tych wyrażeń nie wymaga rozwiązania różniczkowego równania dla procesu adiabatycznego i pozwala na bezpośrednie obliczenia wspomnianych wielkości przy użyciu dwu równań stanu: dla ciśnienia i energii, obu w funkcji gęstości i temperatury.

Do równań stanu wprowadzono informację o mikroskopowych własnościach ośrodka, poprzez współczynnik wirialny, i w konsekwencji, zawarty w nim potencjał oddziaływań międzymolekularnych (przybliżenie oddziaływania w parach).

W artykule omówiono bliżej i porównano z doświadczeniem (dla przypadku gazu CO_2) wyniki dla wielkości akustycznych, w następujących modelach potencjałów oddziaływań międzymolekularnych:

a) dla modelu płynu tzw. twardych sfer; b) dla modelu studni prostokątnej; c) dla modelu płynu z potencjałem Lennarda-Jonesa. Wyniki porównano z modelem gazu Van der Waalsa.

Artykuł zawiera również analizę matematycznego zagadnienia stabilności, z jakim mamy do czynienia przy wyznaczaniu parametrów mikroskopowych poprzez pomiary akustyczne.

1. WPROWADZENIE

Do teoretycznego obliczenia takich akustycznych wielkości jak prędkość dźwięku i współczynniki nieliniowości B/A , C/A i wyższe, wykorzystuje się równania stanu odpowiednich ośrodków płynnych. Mogą to być jak w naszym podejściu wyrażenia dla ciśnienia i energii wewnętrznej, oba w funkcji gęstości i temperatury ośrodka. Warto podkreślić, że wykorzystywanie w przeszłości w tego typu obliczeniach jedynie pierwszego ze wspomnianych równań, wydaje się być podejściem nieuzasadnionym z naszego punktu widzenia. Wprowadza się bowiem uproszczenie w termodynamicznym opisie ośrodka, które nie jest konieczne, tam gdzie można sformułować drugie równanie stanu, dla energii

wewnętrznej. Wykorzystując do wspomnianych obliczeń, termodynamiczne równania stanu dla ośrodków płynnych wprowadzamy połączenie między wielkościami termodynamicznymi i akustycznymi, a jednocześnie tworzymy pomost pomiędzy akustyką płynów i fizyką własności mikroskopowych tych ośrodków. Jest to możliwe dzięki wprowadzeniu do równań stanu oddziaływań międzymolekularnych (zostało to już częściowo omówione w [2]), poprzez współczynnik wirialny.

2. PODSTAWOWE FORMUŁY OBLICZENIOWE

Istnieje obecnie wiele modeli potencjałów oddziaływań molekularnych dla płynów, aby przybliżyć istotę rozważanego zagadnienia skupiliśmy się na najprostszych wykorzystując je do opisu gazu CO₂. Gaz CO₂ jest to gaz o molekułach liniowych, w energetycznym opisie którego, dużą rolę odgrywają oscylacje atomów w cząsteczce, o wiele bardziej istotną jak ich rotacje. Stąd też w niektórych uproszczonych podejściach energię tych drugich można po prostu zaniedbać. Niezależnie od rodzaju gazu formuły obliczeniowe mają postać: a) równania stanu dla płynów, gdzie β to, w ogólności, funkcja zależna od temperatury, wprowadzająca kolejne modele potencjału oddziaływań międzymolekularnych, (oraz u – energia wewnętrzna na jednostkę masy, f – liczba energetycznych stopni swobody dla molekuly rozważanego gazu; pozostałe oznaczenia przyjęto tak jak zazwyczaj),

$$p = \frac{\rho N_o k T}{\mu} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{N_o \rho}{\mu} \beta(T) \right), \quad u = \frac{f}{2} \frac{N_o k T}{\mu} + \frac{\rho}{2} \left(\frac{N_o}{\mu} \right)^2 k T^2 \frac{\partial \beta(T)}{\partial T} \quad (1)$$

b) wzór ogólny dla prędkości dźwięku, uzyskany metodą zaproponowaną przez autorów w [2], dla powyższych równań stanu.

$$c_o^2 = \left(\frac{dp}{d\rho} \right)_{ds=0} = \frac{N_o k T}{\mu} \left\{ T - \frac{N_o}{\mu} \rho T \beta(T) + \left[\rho - \frac{1}{2} \frac{N_o}{\mu} \rho^2 \left[\beta(T) + T \frac{\partial \beta(T)}{\partial T} \right] \right] \frac{dT}{d\rho} \right\}$$

$$\frac{dT}{d\rho} = \left\{ \frac{p}{\rho^2} - \left(\frac{N_o}{\mu} \right)^2 \frac{k T^2}{2} \frac{d\beta}{dT} \right\} \left\{ \frac{f k N_o}{2\mu} + \left(\rho k T \left(\frac{N_o}{\mu} \right)^2 \right) \left(\frac{d\beta}{dT} + \frac{T}{2} \frac{d^2 \beta}{dT^2} \right) \right\}^{-1} \quad (2)$$

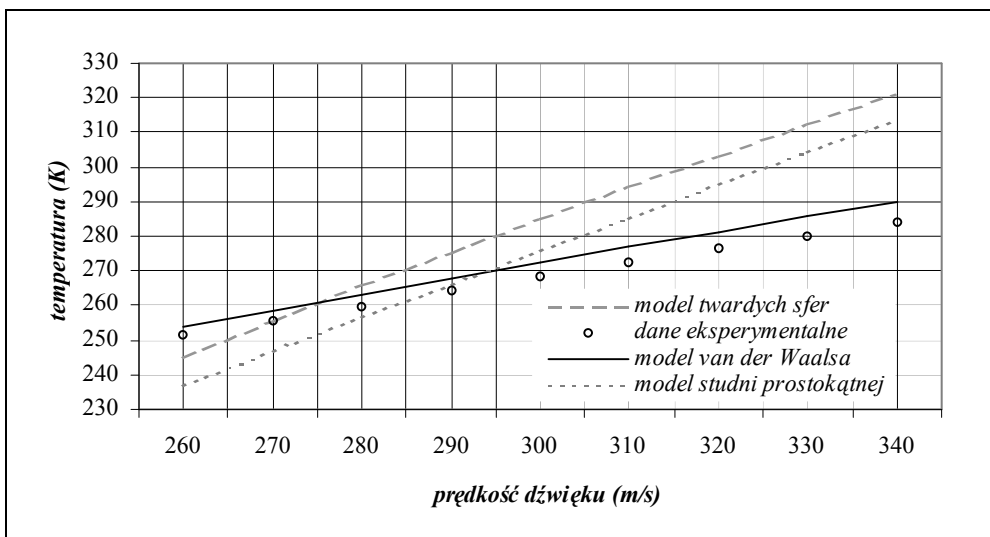
Dalsze różniczkowanie wyrażenia dla prędkości dźwięku pozwoli nam uzyskać formuły dla B/A i wyższych współczynników, formuły te, jak i same obliczenia są bardzo skomplikowane.

Funkcja β to w ogólności całka o postaci: $\beta(T) = 4\pi \int_0^{\infty} (1 - \exp(-u/kT)) r^2 dr$.

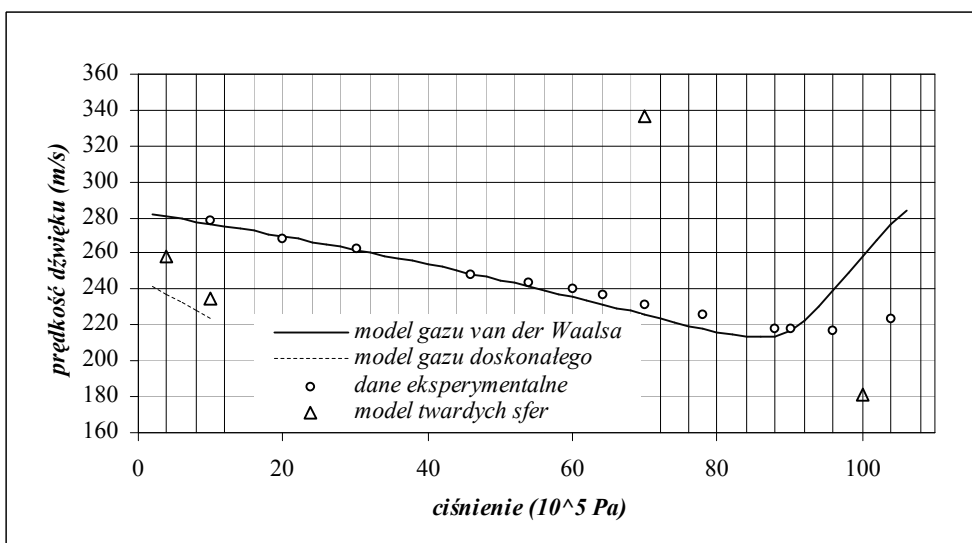
Modele potencjałów międzymolekularnych, użyte do obliczeń, w niniejszym artykule (zaczepnięte np. z [1]) przyjmujemy w formie następujących wzorów:

- model twardych sfer: $\beta = \frac{4}{3} \pi d^3$, gdzie d – średnica twardej sfery;
- model prostokątnej studni potencjału: $\beta = \frac{2\pi}{3} \sigma^3 \left\{ 1 - (R^3 - 1)(\exp(\varepsilon/kT) - 1) \right\}$,
gdzie σ - promień twardego rdzenia, $R\sigma$ - promień obwodu studni, ε - głębokość studni;
- dla porównania - model Van der Waalsa jak w [2].

3. WYKRESY DLA PRĘDKOŚCI DŹWIĘKU



3.1 Wykres zależności prędkości dźwięku od temperatury dla gazu CO₂. Porównanie wyników dla kilku modeli przy ciśnieniu 1 atm. oraz danych eksperymentalnych [3].



3.2 Wykres zależności prędkości dźwięku od ciśnienia dla gazu CO₂. Porównanie wyników dla kilku modeli w temperaturze 50°C oraz danych eksperymentalnych [3].

Wykres 3.1, pokazujący zależność prędkości dźwięku od temperatury, dla kilku modeli potencjałów molekularnych, sporządzono, w taki sposób dobierając współczynniki znajdujące się we wzorach dla potencjałów, aby spełnione było równanie stanu dla ciśnienia. Tak odnalezione współczynniki spełniają swą rolę coraz gorzej w miarę wzrostu temperatury, co sugeruje, że uzasadnione będzie zastosowanie bardziej rozwiniętych metod dopasowywania krzywych do wyników doświadczalnych.

Przedstawiony tu problem, to jedno z tzw. zagadnień odwrotnych; w tym przypadku - wykorzystanie informacji o wielkościach akustycznych, charakteryzujących dany ośrodek, do tworzenia jego opisu na poziomie mikroskopowym (modelowanie potencjałów międzymolekularnych).

Wykres 3.2, przedstawia krzywą dla gazu CO₂ dla wysokich ciśnień, z charakterystycznym minimum przy dziewięćdziesięciu kilku tysiącach paskali. Niektóre modele, dla podanych zakresów ciśnień dają nam jedynie kilka wartości rzeczywistych dla prędkości dźwięku. Jak widać, nie wszystkie te modele potencjałów uwzględniają odpowiednio, szczególne zachowanie się dwutlenku węgla.

4. PODSUMOWANIE

Istota zagadnienia, czyli badanie wzajemnej relacji między opisem makroskopowym ośrodków płynnych (akustyka) a mikroskopowym (potencjały oddziaływań międzymolekularnych) wydaje się być jasna. Same obliczenia natomiast wprowadzają pewne nowe problemy. Po pierwsze, są to trudności numeryczne związane z koniecznością stosowania dość skomplikowanych wzorów i przeliczeń, oraz bardzo dużymi różnicami w rzędach wartości wykorzystywanych do obliczania, np. $k \sim 10^{-23}$, $N_0 \sim 10^{23}$, $\beta \sim 10^{-25}$. Następny, poważny problem, to niestabilności występujące w samym zagadnieniu obliczania wielkości akustycznych. Oznacza to w naszym przypadku, że małe zmiany wartości użytych do obliczeń powodować mogą duże zmiany w uzyskanych wynikach. Wymaga to zastosowania odpowiednich metod matematycznych.

LITERATURA

1. J. A. FAY, Molecular Thermodynamics, Addison-Wesley Reading, Massachusetts, 1965.
2. M. KUŚMIREK-OCHRYMIUK, S. LEBLE, Od parametrów akustycznych dla płynów do parametrów mikroskopowych: interpretacja statystyczno – termodynamiczna, Materiały konferencyjne, XV Otwarte Seminarium z Akustyki, Szczyrk, 2003.
3. Tables of thermal properties of gases, Nat. Bureau of Standards. Circular, 564, 1955.