# Аннотация

Знание теплофизических свойств вещества и в первую очередь уравнения состояния необходимо для многочисленных научных и технологических приложений. Это задачи физики ударных волн, магнитно-гидродинамических генераторов, высокоскоростных соударений и противометеоритной защиты, сильноточных разрядов, магнитной кумуляции, штамповки электровзрывом, мощных газоразрядных лазеров, электровзрывных размыкателей цепи, термоядерных мишеней, сильных взрывов, обтекания гиперзвуковых летательных аппаратов и многие другие. При этом для надежного проектирования перспективных конструкций обычно требуется знать уравнение состояния с высокой точностью.

На практике зачастую необходима возможность быстрого вычисления средних величин: степеней ионизации и термодинамических функций. Одним из подходов к их определению является улучшенный метод Райзера [1], обладающий низкой вычислительной сложностью.

Пусть газовая плазма образована *j*-ми элементами с относительными концентрациями , относительные концентрации электронов равны , а *k*-кратных ионов –  (, где  – порядковый номер элемента, значение  соответствует нейтральному атому). Тогда ее состав хорошо описывается моделью ионизационного равновесия (моделью Саха [3]):



Здесь *T* – температура, *V* – объем ячейки,  и  – потенциал *k*-кратной ионизации и статистическая сумма *j*-го элемента. Для числа частиц и зарядов выполняются уравнения баланса:



Помимо полной концентрации электронов  введем в рассмотрение их парциальные концентрации . Это те концентрации электронов, которые были бы в том случае, если бы *j*-й элемент занимал весь объем. Для них будет выполняться уравнение баланса



Таким образом, если известны парциальные концентрации , то задача нахождения полной концентрации электронов смеси  сводится к поиску нуля функции .

В работах [3, 4] Ю.П. Райзером был предложен алгоритм расчета состава плазмы одного элемента. Главным недостатком данного метода является существенное увеличение погрешности при переходе от одной электронной оболочки к другой, а также непригодность модели для слабой ионизации ().

В работе [1] было описано улучшение метода Райзера, которое позволяет обеспечить более высокую точность во всем диапазоне температур, и обобщается на смеси любого числа элементов. В данном методе используется факт того, что ионизация слабо зависит от статистических сумм, поэтому полагается



При заданных *T* и *V* концентрации ионов  с увеличением кратности *k* сначала монотонно возрастают, затем монотонно убывают. Результаты расчетов показывают, что в газах присутствуют в значительном количестве только ионы двух, максимум трех кратностей, следовательно, распределение  по *k* имеет вид узкого и острого пика. Поэтому можно сделать допущение, что на максимуме два иона соседних кратностей имеют одинаковые концентрации (), а концентрациями прочих ионов можно пренебречь.

В силу сделанных упрощений из уравнений можно получить выражение для концентрации электронов:





Следует отметить, что потенциалы ионизации  известны из экспериментов только для целочисленных значений *k*. Поэтому необходимо построить непрерывную функцию  так, чтобы совпадали значения , полученные решением уравнений и .

В работе [1] была предложена следующая интерполяция при :



где



Для крайних отрезков предлагается использовать экстраполяцию



где значения  и  соответствуют  и .

Таким образом, уравнение примет вид



откуда можно получить следующее выражение для потенциала ионизации элемента смеси:



Здесь в левой части стоит зависимость потенциала ионизации *j*-того элемента  от парциальной концентрации электронов , для определения которой используются и . Несложно показать, что интерполяция имеет обратную функцию



где



Аналогично для экстраполяции :



где значения  и  соответствуют  и .

В результате можно получить следующий алгоритм определения значения функции для произвольной концентрации электронов :

1. Для заданной  найти потенциал ионизации *j*-того элемента  согласно . Следует отметить, что при таком способе вычисления он окажется одинаковым для всех элементов смеси.
2. Вычислить парциальные концентрации электронов  согласно и .
3. Подставляя полученные  в , найти значение функции .

Можно показать, что функция  монотонно возрастает от  до некоторого положительного значения на интервале , следовательно, уравнение имеет на нем единственный корень. Также следует отметить, что производная  является разрывной, что делает неэффективным применение методов поиска корня, использующих производные функции.

Методы дихотомии и золотого сечения обладают высокой «надежностью», но не обеспечивают быстрой сходимости. Метод парабол, напротив, обладая высокой скоростью, не может обеспечить достаточно надежной сходимости к решению [5]. В данной работе был использован модифицированный метод парабол, позволяющий улучшить сходимость итерационного процесса.

Пусть ,  и  – левая, правая и центральная точки отрезка  такого, что целевая функция  имеет разный знак на его концах, ,  и  – значения  в соответствующих точках. Тогда итерационный процесс поиска корня  с заданной точностью *ε* можно описать следующим образом:

1. Вычислить величины



1. Если , то перейти к шагу 6. Иначе вычислить



1. Ели , то . Иначе .
2. Если  и , то перейти к шагу 6. Иначе перейти к шагу 5.
3. Если  и , то перейти к шагу 6. Иначе перейти к шагу 7.
4. Если , то , иначе .
5. Вычислить .
6. Если , то обозначить  и закончить вычисление. Иначе перейти к шагу 9.
7. Если , то обозначить



Иначе обозначить



1. Если  или , то прейти к шагу 11. Иначе перейти к шагу 1. Здесь *γ* – минимальное число, достигаемое на используемой разрядности вычислений.
2. Если , то обозначить  и закончить вычисление. Иначе обозначить  и закончить вычисление.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
| Метод поиска корня | Предложенный метод | | Метод Брента | |
| Среднее число вызовов целевой функции |  |  |  |  |
| 9.74 | 13.04 | 13.62 | 22.30 |

**Таблица 1.** Среднее число вызовов функции для смеси NOAr (0.78, 0.21, 0.01) при ,  и .

# Заключение

Улучшенное приближение Райзера [1] хорошо описывает такие средние величины, как степень ионизации и термодинамические функции. Однако данная модель грубо описывает концентрации ионов, так как при каждой температуре допускает присутствие в плазме только двух ионов с суммой концентраций, равной единице. Также равна единице и максимальная концентрация каждого из таких ионов. Истинные же концентрации изменяются плавно, а максимальные концентрации имеют значения меньшие единицы. Кроме того, при заданной температуре заметную концентрацию могут иметь более двух ионов [3]. Результаты сравнения улучшенного метода Райзера с моделью, учитывающей вырождение электронов [6], приведены в таблице 1 и на рис. 1-3.

Также следует отметить, что метод расчета, предложенный в разделе 2, позволяет снизить вычислительную сложность поиска минимума целевой функции по сравнению с методом дихотомии, предложенным для минимизации в [1].

|  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| а. е.  Смесь | 1.00 | 2.00 | 3.00 | 4.00 | 5.00 | 6.00 |
| NOAr  0.78, 0.21, 0.01 | 2.12 / 9.83 | 1.22 / 5.95 | 0.76 / 4.15 | 0.49 / 2.85 | 0.34 / 2.30 | 0.33 / 2.38 |
| ArKr  0.5, 0.5 | 0.95 / 4.34 | 0.49 / 2.01 | 0.30 / 1.16 | 0.22 / 1.11 | 0.16 / 0.79 | 0.16 / 0.93 |
| LiH  0.5, 0.5 | 3.19 / 13.64 | 2.00 / 9.32 | 1.32 / 6.28 | 1.08 / 5.70 | 0.88 / 4.69 | 0.78 / 4.34 |
| **Таблица 1.** Среднеквадратическая и максимальная погрешности (в процентах) улучшенного метода Райзера при  эВ. | | | | | | | |

|  |
| --- |
|  |
| **Рис. 1.** Погрешность улучшенного метода Райзера (в процентах) для смеси NOAr (0.78, 0.21, 0.01). |

|  |
| --- |
|  |
| **Рис. 2.** Погрешность улучшенного метода Райзера (в процентах) для смеси ArKr (0.5, 0.5). |
|  |
| **Рис. 3.** Погрешность улучшенного метода Райзера (в процентах) для смеси LiH (0.5, 0.5). |

# Список литературы

1. Бураков М. В., Калиткин Н. Н. // ДАН, 2011. Т. 441. №2. С. 183.
2. База данных ТЕФИС. Термодинамические свойства веществ / Белов А.А. [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В. Келдыша, 2018. № 219. 20 с.
3. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных газодинамических явлений. –М.: Наука, 1966.
4. Райзер Ю.П. // ЖЭТФ, 1959. Т. 36. №5. С. 1583.
5. Калиткин Н.Н. Численные методы. –М.: Наука, 1978. – 512 с.
6. Калиткин Н.Н., Ритус И.В., Миронов А.М. Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов // Препринты ИПМ, 1983. №46. 27 с.