# 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 плазма состоит из *j*-x элементов с относительными концентрациями , относительные концентрации электронов равны , а *k*-кратных ионов –  (, где  – порядковый номер элемента, а  соответствует нейтральному атому). Для идеальной плазмы состав удовлетворяет уравнениям Саха [2]:



Здесь *T* – температура, *V* – объем ячейки, приходящейся в среднем на один ион,  – статистическая сумма соответствующего иона. Выполняются уравнения баланса числа частиц и зарядов:



Наряду с полной концентрацией электронов  введем также парциальные концентрации электронов . Это те концентрации электронов, которые были бы в том случае, когда *j*-й элемент занимал бы все пространство. Для них выполняется уравнение баланса



Таким образом, задача нахождения концентрации электронов смеси  сводится к минимизации функции .

Для плазмы одного элемента Ю.П. Райзер предположил несложный алгоритм расчета состава [3, 4]. Однако данный метод дает удовлетворительные результаты только пока ионизация происходит в пределах одной электронной оболочки. При переходе от одной оболочки к другой погрешность метода существенно возрастает, а для слабой ионизации () становится огромной.

В работе [1] был предложен улучшенный метод Райзера, который обладает более высокой точностью во всем диапазоне температур и обобщается на смеси любого числа элементов. В данном методе предполагается, что ионизация слабо зависит от статистических сумм, то есть



При заданных *T* и *V* концентрации ионов  с увеличением кратности *k* сначала монотонно возрастают, затем монотонно убывают. Для неплотных газов эти изменения быстрее, так что распределение по *k* имеет острый максимум. Поэтому предполагается, что на максимуме два иона соседней кратности 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 правой части стоит полная концентрация электронов , а в левой – потенциал ионизации *j*-того элемента . Данная зависимость является обратной к и . Несложно показать, что имеет обратную функцию



где



Аналогично для :



где значения  и  соответствуют  и .

В результате можно получить следующий алгоритм нахождения значения функции для произвольного :

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

Можно показать, что построенная предложенным образом функция  монотонно возрастает от  до некоторого положительного значения на интервале  Следовательно, уравнение имеет единственный корень на этом интервале. Также следует отметить, что производная  является разрывной, что делает неэффективным применение к  методов минимизации, использующих производные функции [1].

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 в плазме может присутствовать только два иона, причем сумма их концентраций равна единице. Также равна единице и максимальная концентрация каждого из таких ионов. Истинные же концентрации изменяются плавно, а максимальные концентрации меньше единицы. Кроме того, при заданной температуре заметную концентрацию могут иметь сразу несколько ионов [2]. 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.