

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

1381/83

P5-82-899

21/3-83

П.Д.Ширков

ПРИБЛИЖЕННЫЕ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ
РАСЧЕТА СОСТАВА РАВНОВЕСНОЙ ПЛАЗМЫ

Направлено в журнал
"Вычислительная математика
и математическая физика"

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

Расчеты химического и ионизационного равновесия являются основой для нахождения термодинамических функций и коэффициентов переноса газа и требуют весьма трудоемкой работы^{/1-5/}. При определении концентраций частиц различных сортов для каждой пары значений температуры и плотности приходится решать нелинейную систему алгебраических уравнений. Численное решение указанной системы связано со многими трудностями, которые, в первую очередь, определяются ее видом. Коэффициенты системы уравнений представляют собой отношения статистических сумм соответствующих компонент^{/1/} и являются быстро меняющимися функциями температуры. Кроме того, при фиксированных значениях температуры и плотности значения различных коэффициентов системы различаются, как правило, на несколько порядков. Это делает затруднительным использование, например, градиентных методов, так как матрица производных системы является плохо обусловленной^{/6/}. Добавок остается открытым вопрос об области сходимости^{/5,7/}.

Несмотря на то, что в литературе имеется большое число расчетов состава, термодинамических функций и транспортных свойств равновесной плазмы /см. /2,4,5,8-10/ и библиографию к ним/, их практическое использование, например, в газодинамических программах является затруднительным. Это связано с тем, что известная методика определения макроскопических параметров среды в силу своей громоздкости требует количества машинного времени /для расчета набора параметров при заданных значениях температуры и плотности/ существенно большего, чем расчет уравнений газовой динамики в одной координатной точке. Предварительное составление подробных таблиц и их интерполирование приводит к приблизительно одинаковым величинам характерных времен газодинамических и термодинамических расчетов, но существенно увеличивает рабочую память программ.

Поэтому для практических целей полезно иметь простой приближенный метод, позволяющий с минимальными затратами вычислять степени ионизации и диссоциации, а также термодинамические функции любого газа. Среди попыток заменить исходную громоздкую систему уравнений равновесного состава плазмы самым успешным оказался метод Райзера^{/1,11/} для расчета ионизационного равновесия среды. Основным его недостатком является то, что он не учитывает диссоциацию и ионизацию молекул, а точность его недостаточна для расчета коэффициентов переноса и оптических свойств среды.

В работе^{/12/} предложена методика построения аналитических моделей для расчета состава химически реагирующей, диссоциирующей и ионизирующей плазмы. При этом предполагается, что состав среды образуется в результате последующих /и независимых/ реакций диссоциации и ионизации атомов и молекул. Такую модель мы будем называть расщепленной /РМ/. Она допускает простое аналитическое решение. Использование РМ для веществ с потенциалами диссоциации молекул, существенно меньшими, чем потенциалы ионизации атомов и молекул /например, для азотной плазмы^{/13/}/, естественно.

В настоящей работе проводится математическое исследование качества РМ. Получены простые априорные оценки точности РМ в зависимости от значений величин

$$I_A - D_M, I_M - D_M,$$

где I_A , I_M - соответственно потенциалы ионизации атома сорта А и молекулы сорта М; D_M - потенциал диссоциации молекулы сорта М. Построена уточненная расщепленная модель /УРМ/, следующая из полной системы равновесного состава. Показано, что РМ может быть использована для расчета химического и ионизационного равновесия и термодинамических функций, а УРМ - для определения электронных компонент коэффициентов переноса и оптических свойств среды. Проведено сравнение расчетов по РМ и УРМ с численным решением исходной системы. Предложен простой и эффективный итерационный процесс для расчета химического и ионизационного равновесия. Построена РМ для расчета многократной ионизации, по точности почти не уступающая модели Райзера^{/1,11/}. Возможность использования РМ исследовалась на неблагоприятном случае - на примере молекул ВаF и CsBr, потенциалы ионизации атомов или молекул которых меньше, чем потенциалы диссоциации молекул.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ И ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ ИХ РЕШЕНИЯ

1. Низкотемпературная плазма. Рассмотрим газ, находящийся в локальном термодинамическом равновесии. Для простоты будем считать, что он состоит из нейтральных молекул M_0 , образованных из двух атомов сорта А0, их однократных ионов M_1 , А1 и электронов. Состав такой плазмы описывается системой нелинейных алгебраических уравнений, неизвестными которых являются концентрации частиц каждого сорта^{/1/}:

$$x_{A0} + x_{A1} + 2x_{M0} + 2x_{M1} = 1, \quad /2.1a/$$

$$x_{A1} + x_{M1} = x_E, \quad /2.16/$$

$$x_{M0} = C_M x_{A0}^2, \quad x_{A1} = C_{A1} \frac{x_{A0}}{x_E}, \quad x_{M1} = C_{M1} \frac{x_{M0}}{x_E}. \quad /2.1в/$$

Здесь x_B - концентрация частиц сорта В; x_E - концентрация электронов, а величины C_M, C_{A1}, C_{M1} являются функциями температуры и плотности газа и пропорциональны отношению статистических сумм соответствующих элементов^{/1/}. При этом под концентрациями частиц мы будем понимать общее число частиц данного сорта, отнесенное к общему числу ядер системы. Не останавливаясь на проблеме выбора статистических сумм, заметим, что в численных расчетах для всех элементов, входящих в систему /2.1/, они обрывались одинаково.

Как показано в^{/14/}, равновесный состав химической смеси определяется однозначно. Однако система /2.1/ не может быть решена в радикалах и требует численного решения. Оно может быть получено, например, сведением исходной системы уравнений /2.1/ к одному с последующим применением метода "вилки"^{/6/}. Такой подход является надежным, но малоэффективным. Кроме того, его применение к расчету равновесного состава многокомпонентных сред является затруднительным.

2. Итерационный метод. Удастся построить быстросходящийся итерационный процесс для численного решения системы /2.1/. Опишем его. Будем строить итерации по величине концентраций электронов в среде x_E . Предположим, что известно очередное приближение $x_E^{(n)} > 0$. Тогда, учитывая соотношения /2.1в/, мы можем из /2.1а/ получить квадратное уравнение для концентраций нейтральных атомов:

$$x_{A0}^{(n)} \left(1 + \frac{C_{A1}}{x_E^{(n)}}\right) + 2(x_{A0}^{(n)})^2 \left(1 + \frac{C_{M1}}{x_E^{(n)}}\right) C_M = 1. \quad /2.2а/$$

Найдя его положительный корень /второй корень отрицателен и физического смысла не имеет/ и воспользовавшись соотношениями /2.1б/, /2.1в/, получим очередное приближение концентраций электронов:

$$x_E^{(n+1)} = (x_{A0}^{(n)} C_{A1} + (x_{A0}^{(n)})^2 C_M C_{M1})^{0,5} = \phi(x_E^{(n)}). \quad /2.2б/$$

Справедлива

Теорема 1. Итерационный процесс /2.2а/, /2.2б/ сходится при любом начальном приближении $x_E^{(n)} > 0$ к решению системы /2.1/. В окрестности решения сходимость будет линейной со знаменателем $q \leq 0,5$.

Для доказательства теоремы достаточно вычислить производную

$\frac{d\phi}{dx_E}$ и оценить ее модуль в точках $x_E = x_E^{(n)}$ равномерно по $n, n=1,2,\dots$

Замечание. Наихудшая скорость сходимости процесса /2.2а/, /2.2б/ в окрестности решения системы /2.1/ будет наблюдаться в области однократной ионизации /то есть при $x_E \approx 1/$. В этом случае

$$\left| \frac{d}{dx_E} \phi(x_E^{(n)}) \right| \approx 0,5.$$

В области слабой ионизации

$$\left| \frac{d}{dx_E} \phi(x_E^{(n)}) \right| < 2x_E,$$

то есть сходимость будет очень быстрой.

При практическом применении процесса /2.2а/, /2.2б/ для расчета состава азотной плазмы оказалось, что фактически имеет место более быстрая сходимость, чем установленная в теореме 1.

3. Многократная ионизация. Метод /2.2/ может быть без труда обобщен для более сложной смеси или расчета последующих ионизаций. Покажем, как это можно сделать, например, для расчета состава многократно ионизирующейся простой смеси /то есть смеси, состоящей из нейтральных атомов одного сорта и их ионов/. В этом случае систему уравнений^{/1/} можно записать в следующем виде:

$$x_{A0} \left(1 + \sum_{r=1}^p \frac{C_r}{x_E^r}\right) = 1, \quad x_E = \sum_{r=1}^p r \frac{C_r}{x_E^r} x_{A0}, \quad /2.3/$$

где p - максимальная степень ионизации атома А, а величина $x_{A0} \frac{C_r}{x_E^r}$ равна концентрации ионов кратности $r, r=1,\dots,p$. Константы $C_r, r=1,\dots,p$, являются функциями температуры и плотности и определяются отношениями статистических сумм соответствующих элементов.

Итерационный процесс для системы /2.3/ запишем в виде

$$x_{A0}^{(n)} = \left(1 + \sum_{r=1}^p \frac{C_r}{(x_E^{(n)})^r}\right)^{-1}, \quad x_E^{(0)} > 0, \quad /2.4а/$$

$$x_E^{(n+1)} = \left(\sum_{r=1}^p r \frac{C_r}{(x_E^{(n)})^{r-1}} x_{A0}^{(n)}\right)^{0,5}, \quad n = 1,2,\dots \quad /2.4б/$$

Справедлива

Теорема 2. Итерационный процесс /2.4а/, /2.4б/ сходится в предположениях модели Райзера /11/ в окрестности решения системы /2.3/ линейно со знаменателем $q \leq 0,5$. При этом в области слабой ионизации ($x_E \ll 1$) $q \sim x_E/2$, и сходимость будет очень быстрой. Доказательство теоремы опустим.

3. РАСЩЕПЛЕННАЯ МОДЕЛЬ И ЕЕ ТОЧНОСТЬ

Перейдем теперь к описанию математических моделей, допускающих аналитическое решение.

1. Низкотемпературная плазма. Предположим, что состав среды образуется в результате трех независимых, следующих друг за другом реакций: диссоциации молекул $M \rightleftharpoons 2A$, ионизации атомов и молекул $A \rightleftharpoons A_1 + e$, $M \rightleftharpoons M_1 + e$. Такое предположение является естественным для веществ, у которых $I_M > D_M$, $I_A > D_M$. К ним, например, относятся азотная и кислородная плазмы /13/.

Введем следующие обозначения: пусть y_A и y_M - концентрации соответственно атомов сорта А и молекул сорта М, продуктов реакции диссоциации $M \rightleftharpoons 2A$, предшествующей реакциям ионизации атомов и молекул. Для конечных значений концентраций нейтральных атомов и молекул, их ионов и электронов в РМ будем использовать соответственно обозначения y_{A0} , y_{M0} , y_{A1} , y_{M1} , y_E .

Каждая из трех перечисленных реакций описывается самостоятельной системой алгебраических уравнений, допускающих аналитическое решение. Для диссоциации молекул М имеем систему /12/:

$$y_A + 2y_M = 1, \quad y_M = C_M y_A^2. \quad /3.1а/$$

Ионизация атомов А и молекул М описывается соответственно соотношениями

$$y_{A0} + y_{A1} = y_A, \quad y_{A1} = C_{A1} y_{A0} / y_{A1}; \quad /3.1б/$$

$$y_{M0} + y_{M1} = y_M, \quad y_{M1} = C_{M1} y_{M0} / y_{M1}. \quad /3.1в/$$

Решая уравнения /3.1/, получим, что состав равновесной плазмы /в рамках РМ/ описывается набором формул:

$$y_A = ((1 + 8C_M)^{0,5} - 1) / 4C_M, \quad y_M = C_M y_A^2;$$

$$y_{A1} = 0,5((1 + 4y_A / C_{A1})^{0,5} - 1) C_{A1}, \quad y_{A0} = y_A - y_{A1};$$

$$y_{M1} = 0,5((1 + 4y_M / C_{M1})^{0,5} - 1) C_{M1}, \quad y_{M0} = y_M - y_{M1};$$

$$y_E = y_{A1} + y_{M1}.$$

2. Априорные оценки точности. Оценим точность РМ в зависимости от значений величин $I_M - D_M$, $I_A - D_M$. Для этого введем в рассмотрение две безразмерные функции температуры, определяемые равенствами

$$\alpha(T) \equiv C_M C_{A1} = \frac{x_{M0} x_{A1} x_E}{x_{A0}^3} = \frac{y_M y_{A1}^2}{y_{A0} y_A^2} = \theta_1(T) \exp\left\{-\frac{I_A - D_M}{kT}\right\}, \quad /3.2а/$$

$$\beta(T) \equiv C_M C_{M1} = \frac{x_{M1} x_E}{x_{A0}^2} = \frac{y_M y_{M1}^2}{y_{M0} y_A^2} = \theta_2(T) \exp\left\{-\frac{I_M - D_M}{kT}\right\}, \quad /3.2б/$$

где $\theta_1(T)$ и $\theta_2(T)$ - некоторые безразмерные функции температуры /14/; k - константа Больцмана. Для многих реальных веществ функции $\alpha(T)$ и $\beta(T)$ в широком диапазоне температур принимают значения, существенно меньшие 1. Графики функций $\alpha(T)$ и $\beta(T)$, например для азотной смеси, приведены на рис.1. Как будет показано ниже, априорные оценки точности РМ зависят от величин $\alpha(T)$ и $\beta(T)$.

Предположим, что в достаточно широком диапазоне температур, соответствующих диссоциации молекул и первым диссоциациям атомов и молекул, выполняются условия

$$\alpha(T) \ll 1, \quad \beta(T) \ll 1. \quad /3.3/$$

Тогда из соотношений /3.2б/ сразу следует, что $x_{M1} \ll x_{A0}$, то есть ионы молекул не могут преобладать в среде. Пользуясь исходной системой /2.1/, можно определить области температур и плотностей, отвечающих преобладанию следующих компонент среды: x_{M0} , x_{A0} , x_{A1} . Очевидно, что границы этих областей определяются соотношениями $x_{M0} = x_{A0}$, $x_{A0} = x_{A1}$. Действительно, если $x_{M0} > x_{A0}$, то из /3.2/ и /3.3/ сразу следует, что $x_{A0} > x_{A1}$; аналогично, если $x_{A1} > x_{A0}$, то $x_{A0} > x_{M0}$.

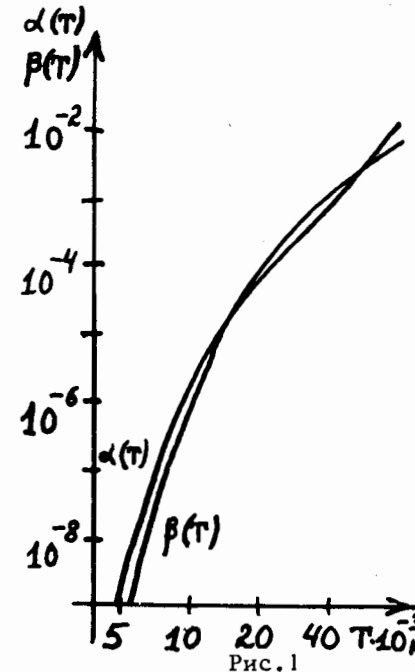


Рис.1

Пусть сначала $x_{M0} = x_{A0}$. Тогда в системе /2.1/ можно исключить неизвестные величины x_{A0} , x_{A1} , x_{M0} , x_{M1} , x_E и найти зависимость плотности от температуры, при которой концентрации нейтральных атомов и молекул равны. Она имеет вид

$$\rho_1(T) \equiv \rho(T, x_{A0} = x_{M0}) = (3 + (a + 2\beta)(a + \beta)^{-0,5}) \rho / C_M.$$

При этом отношение ρ / C_M зависит только от температуры.

Аналогично можно получить, что плотность и температура, при которых $x_{A0} = x_{A1}$, связаны соотношением

$$\rho_2(T) \equiv \rho(T, x_{A0} = x_{A1}) = [2a + \frac{a^2}{\beta^2}(2\beta + 1 - (1 + 4\beta)^{0,5})] \rho / C_M.$$

Нам понадобится также зависимость плотности от температуры, при которой $x_{A1} = x_{M0}$. Она имеет вид

$$\rho_3(T) \equiv \rho(T, x_{A1} = x_{M0}) = (2t^3\beta/a + 3t^2 + t) \rho / C_M, \quad /3.4/$$

где t есть единственный положительный корень уравнения

$$\beta t^4 + at^3 - a^2 = 0.$$

Поскольку $\rho_2(T) < 2a + a^2$, то $\rho_2(T) < \rho_1(T)$. Таким образом, при заданных значениях T и ρ легко определить /не решая исходной системы /2.1//, какая компонента преобладает в среде. Действительно, если при данном значении температуры $\rho > \rho_1$, то в среде преобладают нейтральные молекулы $M0$; если $\rho_1 > \rho > \rho_2$, то преобладают нейтральные атомы $A0$; наконец, если $\rho_2 > \rho$, то преобладают ионы атомов $A1$.

Оказывается, что качество оценок точности РМ существенно зависит от того, какая компонента преобладает в среде. Введем следующие обозначения: пусть $\delta_B = \left| \frac{y_B - x_B}{x_B} \right|$ - относительная погрешность

концентраций частиц сорта B , получаемых в РМ, а T_3 - величина температуры, определяемая из соотношения /3.4/ при заданном значении плотности. Тогда справедлива

Теорема 3. Пусть функции $\alpha(T)$ и $\beta(T)$, определяемые соотношениями /3.2а/ и /3.2б/, удовлетворяют неравенствам /3.3/. Тогда верны следующие асимптотические оценки точности РМ:

1/ в области $\rho > \rho_1$ /преобладают нейтральные молекулы $M0$ /

$$\delta_{A0} \leq \max \{ 0,4(2\beta)^{0,5}; \alpha^{0,5} \}, \quad /3.5а/$$

$$\delta_{M0} \leq 0,8 (2 \max \{ \alpha, \beta \})^{0,5}; \quad /3.5б/$$

2/ в области $\rho_1 > \rho > \rho_2$ /преобладают нейтральные атомы $A0$ /

а/ при $\rho_1 > \rho > \rho_3$

$$\delta_{A0} \leq (2^{3,5} \max \{ \alpha; \beta \})^{1/3}, \quad /3.6а/$$

$$\delta_{M0} \leq 2\delta_{A0}; \quad /3.6б/$$

б/ при $\rho_3 > \rho > \rho_2$

$$\delta_{A1} \leq (2\beta)^{1/3} + 2(\alpha(T_3))^{1/3} \max \{ 1; \frac{\beta}{\alpha} (\alpha(T_3))^{1/3} \}, \quad /3.7а/$$

$$\delta_{A0} \leq 2\delta_{A1}; \quad /3.7б/$$

3/ в области $\rho_2 > \rho$ /преобладают ионы атомов $A1$ /

$$\delta_{A1} \leq 2(a + \max \{ \alpha; \beta \}), \quad /3.8а/$$

$$\delta_{A0} \leq 2\delta_{A1}. \quad /3.8б/$$

Доказательство теоремы не сложно, но громоздко. Мы его опустим.

Замечание 1. Оценка /3.7а/ содержит отношение β/α , которое при $\rho_3 > \rho > \rho_2$ /то есть при $x_{M0} < x_{A1} < x_{A0}$ / для многих реальных веществ - порядка 1 /см., например, рис.1/.

Замечание 2. Может оказаться, что при некоторых значениях T и ρ одновременно выполняются неравенства $x_{M1} > x_{A1}$ и $x_{M1} > x_{M0}$. Тогда оценки /3.7/ и /3.6/ верны соответственно в областях $\rho_1(T) > \rho > \rho_4(T)$ и $\rho_5(T) > \rho > \rho_2(T)$. При этом в неравенстве /3.7а/ необходимо заменить величину $\alpha(T_3)$ на величину $\alpha(T_5)$, где T_5 - значение температуры /при заданной плотности/, при которой $x_{M1} = x_{A1}$. Функции $\rho_4(T)$ и $\rho_5(T)$ задают зависимость плотности газа от температуры, при которой выполняются равенства $x_{M1} = x_{M0}$ и $x_{M1} = x_{A1}$. Они определяются соотношениями

$$\rho_4(T) \equiv \rho(T, x_{M0} = x_{M1}) = \{ 4\beta + \frac{\beta - 2\alpha}{2\beta^2} a (1 + 4 \frac{\beta^3}{\alpha^2})^{0,5} - 1 \} \rho / C_M,$$

$$\rho_5(T) \equiv \rho(T, x_{M1} = x_{A1}) = \frac{a}{\beta} \{ 1 + \frac{2a}{\beta} + 3(\frac{\beta}{2})^{0,5} \} \rho / C_M.$$

В области $\rho_4 > \rho > \rho_5$ верна оценка

$$\delta_{A0} \leq (2 + 2^{0,5}) \beta^{0,5}.$$

Замечание 3. Оценки /3.5/-/3.8/ позволяют априори устанавливать границы применимости РМ. Для этого достаточно задать нужную точность и воспользоваться определением функций $\rho_i(T)$, $i = 1, \dots, 5$.

Замечание 4. Используя данный подход, можно получить РМ для расчетов последующих ионизаций или для определения равновесного состава многокомпонентных смесей. При этом РМ разумно строить таким образом, чтобы последовательно описывались процессы с возрастающими потенциалами реакций. В этом случае можно ожидать, что точность РМ будет достаточной для определения, например, таких термодинамических функций, как внутренняя энергия и давление. Это связано с тем, что указанные величины слабо зависят от концентраций тех или иных компонент и определяются общим числом частиц среды.

4. РАСЩЕПЛЕННАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ РАСЧЕТА МНОГОКРАТНОЙ ИОНИЗАЦИИ

Не ограничивая общности, опишем РМ для случая трехкратно ионизирующегося простого газа. Предположим, что состав плазмы образуется в результате трех независимых, следующих друг за другом реакций: $A \rightarrow A1 + e$, $A1 \rightarrow A2 + e$, $A2 \rightarrow A3 + 3e$. Здесь символами A , $A1$, $A2$, $A3$ обозначены соответственно нейтральные, одно-, двух- и трехкратно ионизованные атомы сорта A . Каждая из указанных реакций описывается простой системой алгебраических уравнений, допускающих аналитические решения.

Например, для реакции образования трехкратных ионов имеем систему

$$y_{A2} + \bar{y}_{A3} = \bar{y}_{A2}, \quad \bar{y}_{A3} = C_3 y_{A2} / y_{E3}, \quad y_{E3} = \bar{y}_{A3}$$

относительно неизвестных величин y_{A2} , \bar{y}_{A3} , y_{E3} . Здесь \bar{y}_{As} и y_{Es} - концентрации соответственно s -кратных ионов и электронов, образовавшихся в результате s -й реакции, y_{As} - концентрация s -кратных ионов в РМ, $s = 1, 2, 3$; $y_{A0} = 1$.

Выпишем решение РМ для случая трехкратной ионизации. Оно имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{y}_{A1} &= 0,5 C_1 ((1 + 4/C_1)^{0,5} - 1); \quad y_{A0} = 1 - \bar{y}_{A1}; \\ \bar{y}_{A2} &= 0,5 C_2 ((1 + 4\bar{y}_{A1}/C_2)^{0,5} - 1); \quad y_{A1} = \bar{y}_{A1} - \bar{y}_{A2}; \\ \bar{y}_{A3} &= 0,5 C_3 ((1 + 4\bar{y}_{A2}/C_3)^{0,5} - 1); \quad y_{A2} = \bar{y}_{A2} - \bar{y}_{A3}, \quad y_{A3} = \bar{y}_{A3}; \\ y_E &= y_{A1} + 2y_{A2} + 3y_{A3}. \end{aligned}$$

Обобщение РМ для последующих ионизаций проводится элементарно.

5. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И УТОЧНЕННАЯ РАСЩЕПЛЕННАЯ МОДЕЛЬ

1. Построим сначала уточнение РМ для задачи /2.1/. Из соотношений /3.3/, /3.5/-/3.8/ видно, что при заданных значениях T и ρ концентрации компонент, преобладающие в среде, вычисляются точно. Кроме того, достаточно точно во всем диапазоне температур и плотностей вычисляются значения концентраций нейтральных атомов. Это позволяет эффективно уточнять концентрации исчезающих компонент (x_{A1} , x_{M0} , x_{M1}). Для этого к соотношениям /3.1/ добавим выражения

$$\begin{aligned} z &= y_{A0} + 2C_M y_{A0}^2 + (C_{A1} y_{A0} + 2C_{M1} C_M y_{A0}^2) (C_{A1} y_{A0} + C_M C_{M1} y_{A0}^2)^{-0,5}, \\ z_{A0} &= y_{A0} / z, \quad z_{M0} = C_M y_{A0}^2 / z; \quad /5.1/ \\ z_E &= (y_{A0} C_{A1} + y_{A0}^2 C_M C_{M1})^{0,5} / z, \quad z_{A1} = \frac{z_{A0} C_{A1}}{z_E z}, \quad z_{M1} = \frac{z_{M0} C_{M1}}{z_E z}, \end{aligned}$$

где z_B - новые приближенные значения концентраций частиц сорта B . Тем самым получена уточненная расщепленная модель /УРМ/. Заметим, что нормировка концентраций на величину z в /5.1/ проведена для того, чтобы в УРМ точно выполнялись балансные соотношения /2.1а/, /2.1б/.

Уточнение РМ для многократной ионизации в данной работе не проводилось.

2. Остановимся теперь на численных результатах. Задавая значения параметров T и ρ из соотношений /3.5/-/3.8/, можно получить априорные оценки точности РМ. На практике оказывается, что они существенно завышены. Это видно сразу, если сравнить априорные оценки /3.5/-/3.8/ в граничных точках областей преобладания тех или иных компонент /то есть при $x_{M0} = x_{A0}$, $x_{A0} = x_{A1}$, $x_{M0} = x_{A1}$ /. Это подтверждается и численными расчетами состава азотной плазмы при $\rho = 1,29 \cdot 10^{-3}$ г·см⁻³, приведенными на рис.2. Сплошной линией показано решение уравнений /2.1/, а штриховой - расчеты по РМ /там, где они отличаются от точного решения/. Кроме того, на рис.2 вертикальными штриховыми линиями обозначены границы областей преобладания тех или иных компонент среды при заданном ρ .

Оказалось, что максимальная ошибка при определении компоненты x_{A0} по РМ в области температур $3 \cdot 10^3 \text{ K} \leq T \leq 3 \cdot 10^4 \text{ K}$ при плотности $\rho = 1,29 \cdot 10^{-3}$ г·см⁻³ не превышала 0,15% /априорные оценки дают 3,5%, то есть они сильно завышены/. Точность УРМ оказалась зна-

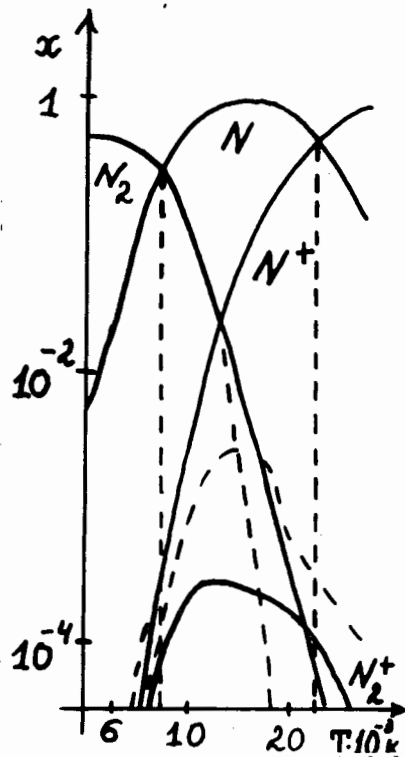


Рис. 2

чительно выше. Так, концентрации нейтральных компонент в указанном диапазоне температур вычислялись по УРМ с ошибкой, не превышающей 0,05%. А максимальная ошибка при расчете исчезающих компонент не превышала 0,1%.

Было проведено сравнение точности вычисления в рамках РМ и УРМ таких макроскопических параметров, как давление и внутренняя энергия газа. Если при расчете давления и внутренней энергии по РМ ошибки соответственно не превышали 0,3% и 0,6%, то в УРМ они упали соответственно до 0,02% и 0,04%. Тем самым показано, что РМ пригодна для определения химического и ионизационного равновесия низкотемпературной плазмы, а также для расчета таких макроскопических величин, как давление и внутренняя энергия. УРМ может быть использована для расчета электронных компонент коэффициентов переноса и определения оптических свойств среды. При этом она обладает достаточной точностью.

3. Проведенные численные расчеты показали, что РМ дает удовлетворительные результаты при определении ионизационного равновесия среды. Оказалось, что при вычислении таких величин, как степень ионизации, давление и внутренняя энергия, РМ по точности почти не уступает методу Райзера^{/1,11/}. Так, относительная ошибка при расчете концентрации в рамках РМ в широком диапазоне температур и плотностей $10^4 \text{ K} \leq T \leq 10^5 \text{ K}$, $1,29 \cdot 10^{-6} \text{ г. см}^{-3} \leq \rho \leq 1,29 \cdot 10^{-1} \text{ г. см}^{-3}$ / не превышала 19%. А относительные погрешности при определении внутренней энергии и давления не превышали соответственно 19% и 10%. Напомним, что при этом, в отличие от метода Райзера, решение по РМ выписывается в явном виде.

4. Качество РМ исследовалось и в неблагоприятном случае, когда потенциалы диссоциации молекул превышали потенциалы ионизации атомов и молекул. К таким соединениям относятся ВаF и CsBr. Их потенциалы разрыва связей таковы, что^{/12/}

$$I_{\text{BaF}} < I_{\text{Ba}} < D_{\text{BaF}} < I_{\text{F}}, \quad I_{\text{Cs}} < D_{\text{CsBr}} < I_{\text{CsBr}} < I_{\text{Br}}$$

Таблица

x_E \ δ	10^{-2}	10^{-4}
0,5	8	14
1	5	10
y_E	2	4
z_E	1	3

Оказалось, что даже в этом случае РМ удовлетворительно применима для расчета таких величин, как давление и внутренняя энергия. Хотя погрешность в определении концентраций, преобладающих в среде, достигала 30%, ошибки в вычислении давления и внутренней энергии не превышали соответственно 7% и 13%.

5. Как показали численные расчеты, РМ и УРМ могут быть использованы как хорошее приближение при уточнении концентраций всех компонент методами /2.2/ и /2.4/. При этом оказалось, что на практике имеет место более быстрая сходимости, чем установленная в теореме 1. Зависимость максимального числа итераций от необходимой относительной погрешности δ и выбора начального приближения $x_E^{(0)}$ дана в таблице, где y_E и z_E - концентрации электронов, соответствующие расчетам по РМ и УРМ.

В заключение хочется выразить искреннюю благодарность Н.Н.Калиткину и В.С.Рогову за внимание к работе и полезные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. Физматгиз, М., 1963.
2. Грязнов В.К., Иосилевский И.Л. В сб.: Теплофизические свойства низкотемпературной плазмы. "Наука", М., 1976, с.25-30.
3. Ковальская Г.А., Севастьяненко В.Г. В сб.: Свойства низкотемпературной плазмы и методы ее диагностики. "Наука", Новосибирск, 1977, с.11-37.
4. Казейкин С.Н. Препринт ИПМ, № 108, М., 1978.
5. Калиткин Н.Н., Царева Л.С. ЖВМ и МФ, 1971, т.11, № 3, с.782-783.
6. Калиткин Н.Н. Численные методы. "Наука", М., 1978.
7. Бахвалов Н.Н. Численные методы. "Наука", М., 1973.
8. Кузнецов Н.М. Термодинамические функции и ударные адиабаты воздуха при высоких температурах. "Машиностроение", М., 1965.
9. Калиткин Н.Н., Кузьмина Л.В., Рогов В.С. Таблицы термодинамических функций и транспортных коэффициентов плазмы. ИМП, М., 1972.
10. Devoto R.S. The Physics of Fluids, 1966, vol.9, No.6, p.1230-1240.

11. Райзер Ю.П. ЖЭТФ, 1959, т.36, № 5, с.1583-1585.
12. Гордеев О.И. и др. В сб.: Теоретические и прикладные проблемы вычислительной математики. ИМП, М., 1981.
13. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. Атомиздат, М., 1980.
14. Зельдович Я.Б. ЖФХ, 1938, т.11, № 5, с.685-687.

Ширков П.Д. Приближенные и численные методы расчета состава равновесной плазмы P5-82-899

В области диссоциаций и первых ионизаций атомов и молекул для расчета концентраций частиц плазмы, находящейся в локальном термодинамическом равновесии, предложена простая математическая модель, основанная на приближенном расщеплении процессов диссоциации и ионизации. Найдены точные решения расщепленной модели и получены априорные оценки ее точности. Построена уточненная расщепленная модель, следующая из полной системы уравнений равновесного состава. Построена расщепленная модель для расчета многократной ионизации среды. Проведены сравнения с численными расчетами состава плазмы. Предложен эффективный итерационный процесс для расчета равновесных концентраций диссоциирующей и ионизирующей среды.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Shirkov P.D. Some Approximate and Numerical Methods for the Equilibrium Plasma Composition Calculation P5-82-899

In order to compute concentrations of plasma particles being in local thermodynamic equilibrium a simple mathematical model is proposed in the region of dissociation and first ionization of atoms and molecules. It is based on the approximate splitting processes of dissociation and ionization. Exact solutions of split model are found and a priori estimates of its precision are obtained. The refinement of split model following from the full system of equilibrium composition is proposed. The split model for the medium multi-ionization calculation is constructed. Comparison with numerical calculations of plasma composition is made. An effective iterative method is proposed to estimate equilibrium concentrations of dissociating and ionizing medium.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Рукопись поступила в издательский отдел
24 декабря 1982 года.

Перевод О.С.Виноградовой.