

На правах рукописи



**Луцкий Константин Игоревич**

# **Широкодиапазонная модель термодинамики газовой и жидкой плазмы**

Специальность 05.13.18 — Математическое моделирование,  
численные методы и комплексы программ

Автореферат

диссертации на соискание учёной степени  
кандидата физико-математических наук

Москва — 2015

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт прикладной математики им. М. В. Келдыша Российской академии наук.

Научный руководитель: **Калиткин Николай Николаевич**,  
член-корреспондент РАН,  
доктор физико-математических наук, профессор.

Официальные оппоненты: **Алфимов Георгий Леонидович**,  
доктор физико-математических наук, доцент,  
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Национальный исследовательский университет «МИЭТ», кафедра «Высшая математика №1».

**Вергунова Галина Алексеевна**,  
кандидат физико-математических наук,  
старший научный сотрудник,  
Федеральное государственное бюджетное учреждение науки  
Физический институт им. П. Н. Лебедева  
Российской академии наук,  
сектор теории лазерной плазмы.

Ведущая организация: Федеральное государственное унитарное предприятие «Российский Федеральный Ядерный Центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики», г. Саров.

Защита состоится 28 января 2016 г. в 11 часов на заседании диссертационного совета Д002.024.03 на базе Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН по адресу: 125047, Москва, Миусская пл., д. 4.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Института прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН а также на сайте [www.keldysh.ru](http://www.keldysh.ru).

Автореферат разослан 18 ноября 2015 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета  
Д002.024.03, к.ф.-м.н.



Корнилина М. А.

## Общая характеристика работы

**Актуальность темы исследования.** Разработка технических конструкций, использующих вещество в экстремальных состояниях, и детальное исследование физических процессов в таких конструкциях являются важной задачей современной науки и техники. Одним из основных инструментов такой работы является математическое моделирование с помощью компьютерных программ радиационной магнитной газодинамики. Физическим наполнением таких программ служат данные о термодинамических и других свойствах веществ в экстремальных состояниях. Математическая точность современных двумерных и даже трёхмерных расчётов на суперкомпьютерах нередко достигает 1%. Поэтому математическое моделирование термодинамических свойств веществ в широком диапазоне температур и плотностей, также обеспечивающее физическую точность на уровне 1%, является актуальной проблемой.

**Степень разработанности темы исследования.** Ионизационное равновесие и термодинамические функции идеальной газовой плазмы строились в работах Саха (1920) и Райзера (1957). Неидеальность плазмы учитывалась в работах Тимана, Ликальтера, Нормана, Баско и других. Качественно правильная поправка на неидеальность найдена Калиткиным и Козлитиним (2008 – 2011). Однако количественный вид этой поправки требовал дальнейшего обоснования.

Термодинамика жидкой плазмы восходит к работам Ферми и Томаса. На ненулевые температуры их модель была обобщена Фейнманом, Метрополисом и Теллером. Поправки к этой модели были рассмотрены Дираком, Вейцеккером, Компанейцем, Киржницем и Калиткиным. Расчёты по этой модели выполнялись Лэттером, Калиткиным и Кузьминой. Однако для их широкого практического использования требовалось создание сверхбыстрого численного метода, позволяющего проводить оперативные расчёты.

Широкодиапазонные уравнения состояния сейчас строят методом лоскутного одеяла — склейкой узкодиапазонных моделей. Так это делается в лос-аламосской библиотеке SESAME. При этом не удаётся обеспечить термодинамическую согласованность получающихся уравнений состояний. Последнее часто приводит к нефизичным эффектам в газодинамических расчётах. Поэтому необходимо разработать метод «склейки» моделей обеспечивающий термодинамическую согласованность.

**Цели и задачи.** Целью данной работы является построение единого широкодиапазонного уравнения состояния, покрывающего область газовой и

жидкой плазмы произвольного состава. Расчёт такого уравнения состояния должен обеспечивать хорошую физическую точность (1%) и существенно более высокую математическую точность (0.1% – 0.01%). Расчёт полных термодинамических таблиц любого конкретного вещества должен выполняться оперативно на персональном компьютере за малое время (на современных портативных компьютерах не превышать нескольких минут).

**Научная новизна.** В диссертации впервые предложены и обоснованы следующие новые результаты.

Предложено новое краевое условие на границе атомной ячейки (названное условием трёх нулей). Из него следует, что поправки на взаимодействие заряженных частиц в газовой плазме оказываются в 2.5 раза меньше, чем приводится во всех статьях и учебниках. Применение новой поправки позволило существенно расширить область применимости модели газовой плазмы в сторону высоких плотностей и низких температур, то есть в область, где её применение раньше было невозможно.

Построен новый специализированный алгоритм для решения уравнений статистической модели атома, описывающей жидкую плазму. Он многократно превосходит ранее известные алгоритмы по быстродействию и точности. Это позволило составить программы для оперативных расчётов термодинамики произвольных веществ.

Предложен новый метод объединения разных дополняющих друг друга моделей в единое широкодиапазонное уравнение состояния, сохраняющее термодинамическую согласованность во всей области фазовой диаграммы. Ранее не существовало методов объединения моделей, обеспечивающих термодинамическую согласованность.

Развит общематематический метод аппроксимации непериодических гладких функций. Определены его оптимальные параметры и построено обобщение на функции двух переменных. Метод применён для аппроксимации термодинамических таблиц жидкой плазмы.

**Теоретическая и практическая значимость работы.** Разработанные в диссертации модели, алгоритмы и программы обеспечивают оперативные расчёты термодинамических свойств как газовой, так и жидкой плазмы. Такое уравнение состояния имеет высокую физическую точность (в частности учитывает влияния оболочечной структуры атома на осцилляции термодинамических кривых) во всей области экстремальных состояний за исключением области твёрдого тела и смеси фаз. Это позволяет создать надёжное физическое наполнение газодинамических программ для расчёта конструкций. Такие данные должны найти применение во многих ведущих организациях: федеральных ядерных центрах в Сарове и Снежинске, Физическом институте им. П. Н. Лебедева РАН, Институте общей физи-

ки им. А. М. Прохорова РАН, Институте прикладной математики им. М. В. Келдыша РАН, Национальном исследовательском центре «Курчатовский институт», Объединённом институте высоких температур РАН, Московском физико-техническом институте и других.

**Методология и методы исследования.** При разработке физических моделей использовались традиционные методы теоретической физики. Верификация этих моделей проводилась путём сравнения с экспериментальными данными.

Специализированные алгоритмы строились на базе отдельных известных численных методов (таких, как составление разностных схем, их разрешение методом дополненного вектора, сгущение сеток с уточнением по методу Рундсона и т. п.). Однако ранее эти методы в данной проблеме не использовались.

При составлении единого комплекса с хорошей автоматизацией и высокой надёжностью расчётов потребовалось найти оригинальные подходы для решения ряда частных проблем.

Для составления программного комплекса был использован язык высокого уровня C++ и методы промышленного программирования: тестирование, автоматическое построение, интеграция, система контроля версий. Это обеспечило высокую производительность и надёжность комплекса. Помимо этого в некоторых случаях использовался комплекс GNU Octave — свободная система для математических вычислений, использующая совместимый с Matlab язык высокого уровня. Для визуализации расчётов и построения графиков дополнительно использовалась библиотека matplotlib на языке программирования Python. Это позволило удобно использовать построенный программный комплекс.

### **Положения, выносимые на защиту:**

- Построена и обоснована новая модель взаимодействия заряженных частиц в плазме. Ее включение в обобщенное уравнение ионизационного равновесия позволило далеко расширить область применимости модели газовой плазмы в сторону низких температур и сверхвысоких плотностей и разумно количественно описать явление ионизации сжатием при нулевой температуре.
- Разработан сверхбыстрый специализированный алгоритм решения уравнений Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. На его основе написана программа для расчета таблиц термодинамических функций жидкой плазмы.
- Разработан метод интерполяции по разным моделям, сохраняющий строгую термодинамическую согласованность давления, энергии и энтропии.

С его помощью построено широкодиапазонное термодинамическое уравнение состояния, одновременно описывающее газовую и жидкую плазму. Разработан алгоритм для расчета такого уравнения состояния и ударных адиабат. Выполнены расчеты ударных адиабат некоторых металлов и получено хорошее согласие с экспериментами при давлениях  $P \geq 20$  Мбар.

- Разработано два метода для аппроксимации гладких непериодических функций одного и двух аргументов рядами Фурье. Это метод двойного периода и метод четно-нечетных продолжений. Найдены оптимальные параметры этих методов. Построены аппроксимации термодинамических функций жидкой плазмы, рекомендуемые в качестве справочных данных, имеющие точность до 0.1%.
- Составлены программы для решения уравнений статистической модели атома с квантовой и обменной поправками. Модернизированы программы для решения обобщенных уравнений ионизационного равновесия в газовой плазме. Составлены программы для расчета широкодиапазонного уравнения состояния, а также программы расчета ударных адиабат. Эти программы объединены в автоматизированный программный комплекс.

**Степень достоверности.** Достоверность математических расчётов подтверждается известными фундаментальными теоремами о сходимости и проведением вычислений на последовательности сгущающихся сеток. В ходе этих расчётов программно проверяется сходимость сеточной функции к некоторому предельному значению. Это достоверно устанавливает математическую точность в пределах ошибок округления компьютера.

Физическая достоверность обеспечивается в газовой области использованием надёжных справочных данных о потенциалах ионизации, а в области жидкой плазмы — использованием статистической модели атома с квантовой и обменной поправками, надёжно апробированной ранее.

**Апробация результатов.** Результаты работы докладывались на семинаре ИПМех им. А. Ю. Ишлинского РАН «Аэрофизика и физическая механика классических и квантовых систем» (14 января 2015), на научно-координационной сессии «Исследования неидеальной плазмы» (Москва, 2 – 3 декабря 2014), на научно-методологическом семинаре НИВЦ МГУ (27 ноября 2014) на семинаре ИПМ им. М. В. Келдыша РАН (29 мая 2014), на семинаре, посвящённом 100-летию со дня рождения Л. В. Альтшулера (Саров, 12 – 13 ноября 2013), на международной конференции 12th International Workshop on the Physics of Compressible Turbulent Mixing (IWPCTM12) — 3 доклада (Москва, 12 – 17 июля 2010), на международной конференции International

Workshop Numerical Analysis and Scientific Computing (NASCom'08, 13-17 октября 2008, Ростов-на-Дону), на совместном семинаре ИММ РАН и кафедры математического моделирования МФТИ (апрель 2008), на международной конференции 3rd Moscow Workshop on Targets and Applications (Москва, 2007), на X и XI Всероссийской школе-семинаре «Современные проблемы математического моделирования» (Абрау-Дюрсо, 2005 и 2003), на Второй Всероссийской конференции памяти А. Ф. Сидорова «Актуальные проблемы прикладной математики и механики» (Абрау-Дюрсо, 2004).

**Публикации.** По теме диссертации всего опубликовано 9 работ в журналах, входящих в перечень ВАК: ДАН — 2, Математическое моделирование — 7, а также 2 работы в сборниках трудов всероссийских конференций.

**Объем и структура работы.** Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Полный объем диссертации составляет 148 страниц текста с 31 рисунком и 17 таблицами. Список литературы содержит 111 наименований.

## Содержание работы

**1. Введение.** В изучаемых современной физикой процессах реализуются самые разнообразные условия, охватывающие состояния от сильно сжатого вещества (плотность которого на порядки превышает плотность твёрдого тела) до разреженного газа в температурном диапазоне от нуля до миллионов градусов.

Диаграмма состояний такого вещества условно показана на рис. 1

Есть состояния, сложные для теоретического описания. Это твёрдое тело, плавление, а также процесс испарения. Однако эти области занимают меньшую часть фазовой диаграммы. Основная часть фазовой диаграммы занята всего двумя состояниями: газовой плазмой и жидкой плазмой. Поэтому во введении формулируется цель работы — создать широкодиапазонное уравнение, описывающее газовую и жидкую плазму.

Дается обзор работ в этой области и обосновывается выбранное направление.

**2. Газовая плазма.** При умеренных плотностях вещество является газом, состоящим из свободных электронов, ионных остовов, и нейтральных атомов. (Низкие температуры и молекулы не рассматриваются.) При малых плотностях этот газ можно считать идеальным. При повышении плотности надо учитывать взаимодействие заряженных частиц.

Предлагалось много поправок на взаимодействие. Наилучшие результаты из них давала поправка, получающаяся из модели однородного элек-

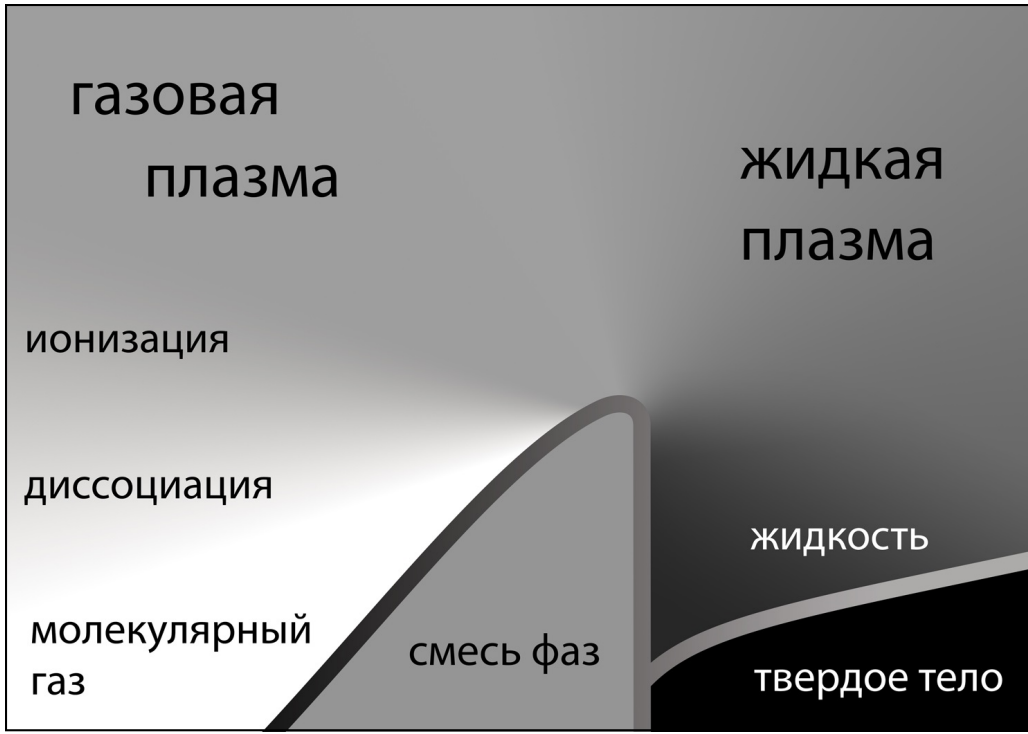


Рис. 1: Диаграмма состояний. Сплошные линии — фазовые переходы.

тронного газа (ОЭГ),  $\Delta E = -0.9z^2/R$ , где  $z$  есть заряд иона, а  $R$  — радиус сферизованной атомной ячейки. Дополнительный учет модели простых гармонических осцилляторов (SHO), принятой в библиотеке SESAME (Лос-Аламос), давал  $\Delta E = -0.9z^2 / (R + 1.8z^2/T)$ , где  $T$  — температура.

В диссертации модели ОЭГ, SHO, а также классическая модель Дебая были подвергнуты ревизии. Было обнаружено, что во всех этих моделях в скрытом виде содержится произвольный параметр — значение потенциала ионного остова на границе атомной ячейки.

Во всех этих моделях суммарный потенциал ионного остова и свободных электронов на границе ячейки полагался равным 0. При этом потенциал ионного остова был  $U(r) = z/r$ , что давало на границе  $U(R) = z/R$ .

Однако, предполагая суммарный потенциал на границе равным нулю, мы фактически считаем границу ячейки заземленной сферой. Поэтому в диссертации предложена естественная модель, в которой на границе ячейки одновременно обращаются в нуль как ионный, так и электронный потенциалы. Условие электронейтральности требует и третьего нуля:  $(dU(r))/(dr) = 0$ . Эта модель заземленной сферы с краевым условием трёх нулей дала следующие результаты. В приближении ОЭГ, поправка на взаимодействие  $\Delta E = -0.4z^2/R$ , что в 2.5 раза меньше общепринятого значения. В приближении неоднородного электронного газа (электронейтральная модель Дебая в ячейке)

$$U(r) = \frac{z}{r} \left( \operatorname{ch} \frac{r}{D} - y \operatorname{sh} \frac{r}{D} \right), \quad y = \frac{\xi \operatorname{th} \xi - 1}{\xi - \operatorname{th} \xi}, \quad \xi = \frac{R}{D}. \quad (1)$$



Здесь  $D$  — дебаевский радиус. При высоких плотностях, когда  $R \ll D$ , это выражение переходит в  $-0.4z^2/R$ . Выражений, аналогичных поправкам SHO при этом не появляется.

Для апробации предложенной модели решались уравнения ионизационного равновесия (обобщенные уравнения Саха) с различными поправками при предельно низких температурах с различными поправками на взаимодействие. Полученная степень ионизации сравнивалась с теми значениями, которые даёт статистическая модель атома Томаса-Ферми (ТФ). Результаты сравнения показаны на рис. 2, где приведена зависимость степени ионизации  $z$  от сжатия для Cu. Модель ТФП не передает оболочечных эффектов, и ее ионизация идет плавно. В модели Саха отчетливо видны скачки, связанные с началом ионизации  $K$ -оболочки (при наибольших плотностях),  $L$ -оболочки и даже  $M$ -оболочки (при меньших плотностях).

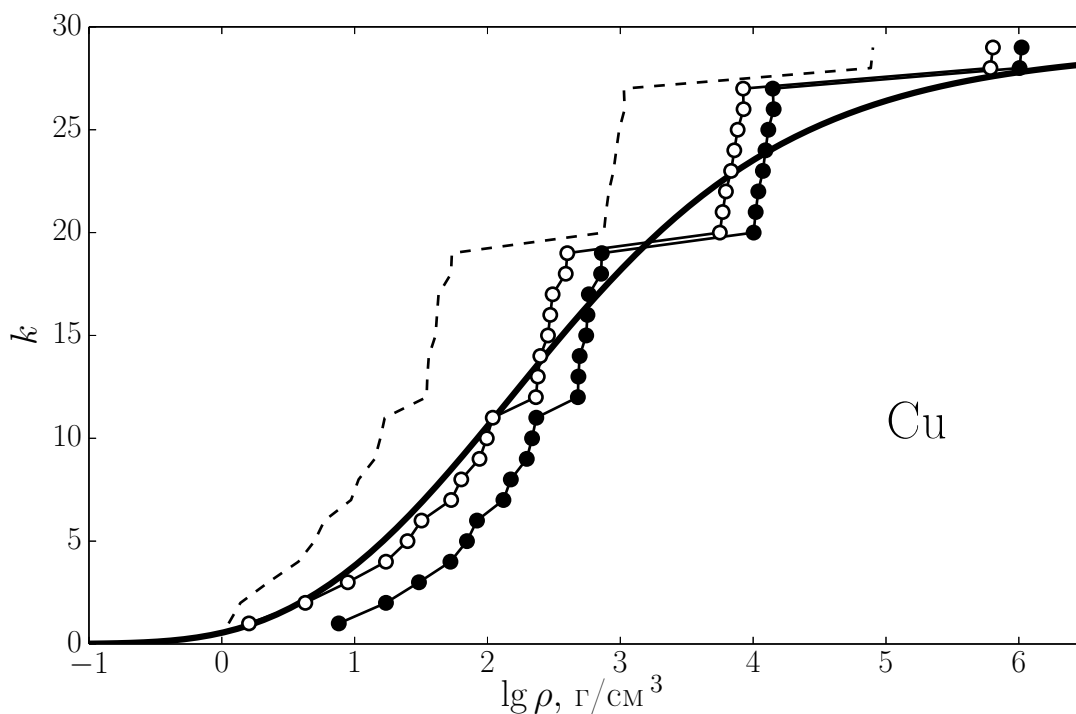


Рис. 2: Кривые холодной ионизации Cu. Жирная линия — ТФП, маркеры — модель Саха: кружок полый — заряд  $z_H$ , точка — заряд  $z_D$ , сплошные линии — предлагаемая поправка, пунктир — классическая поправка с коэффициентом  $9/10$ .

Видно, что для поправки модифицированного ОЭГ с зарядом Хольцмарка  $z_H$  модель Саха хорошо совпадает с ТФП. Нижняя оболочка лежит практически на кривой ТФП, а кривые остальных оболочек пересекаются с ней в своих серединах. При заряде Дебая  $z_D$  совпадение на внутренних оболочках столь же хорошее, но на внешней оболочке существенно хуже. Кроме того, на рис. 2 пунктиром приведена линия ионизации для классической модели ОЭГ (с коэффициентом  $9/10$ ) и  $z_H$ . Она отличается от модели ТФП

примерно в 10 раз по плотности. Таким образом, наилучшие результаты дает модифицированная поправка ОЭГ с зарядом Хольцмарка. Ее будем использовать в дальнейших расчетах.

Высокая точность модели ионизационного равновесия обеспечивается тем, что в ней используются надежные экспериментальные и теоретические справочные данные о потенциалах ионизации всех химических элементов. Включение в неё предложенной поправки на взаимодействие зарядов обеспечивает её применимость даже при сверхвысоких плотностях, пока плазму можно считать газовой. Поэтому естественная граница применимости данной модели следующая: суммарный объём ионных остовов  $V_{core}$  должен быть существенно (в 10 – 100 раз) меньше полного объёма  $V$ . Пусть  $\varkappa$  есть отношение суммарного объёма ионных остовов к полному объёму, тогда  $\varkappa \equiv (V_{core}/V) \ll 1$ .

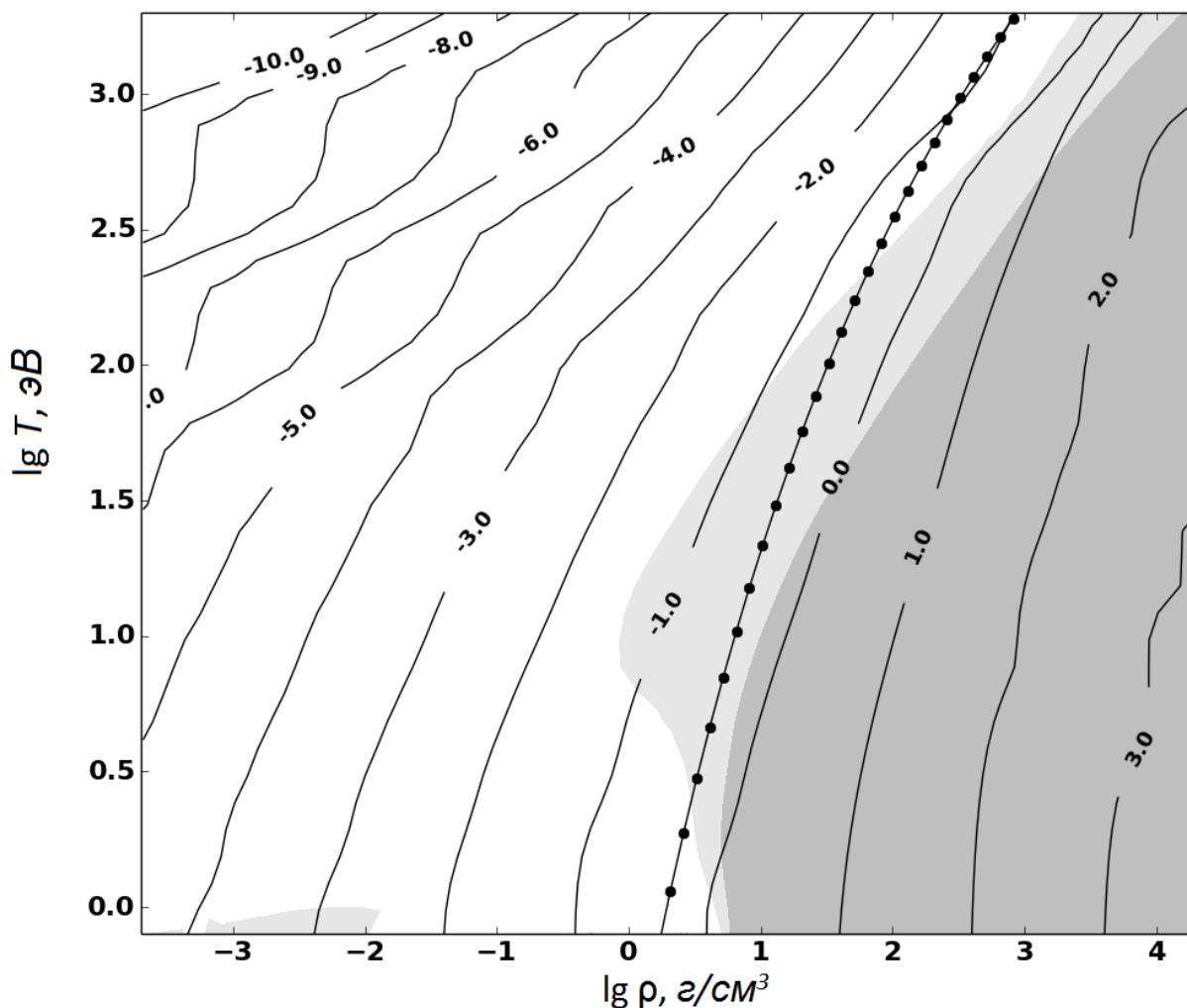


Рис. 3: Изолинии  $lg \varkappa$  для Cu. На линиях указаны значения  $lg \varkappa$ . Жирной линией показана кривая "испарения". Фон указывает отличие моделей Саха и ТФП. Белый — до 1.2 раза. Светлый — от 1.2 до 2.5 раз, темный — свыше 2.5 раз.

На рис. 3 для Cu показаны изолинии  $lg\kappa$ . Если  $lg\kappa < -2$ , то есть  $\kappa < 1\%$ , то вкладом объема остовов можно пренебречь и считать плазму чисто газовой. Если  $lg\kappa = 0$ , то есть ионные остовы занимают весь объем, модель Саха неприменима. Поэтому модель теряет применимость между изолиниями  $-2$  и  $0$ .

**Термодинамическая согласованность.** Модель ионизационного равновесия строится из условия минимума некоторого термодинамического потенциала  $F$  при фиксированных  $T$  и  $V$  относительно вариаций концентраций всех частиц, при выполнении законов сохранения всех элементов и зарядов. Остальные термодинамические функции находятся дифференцированием термодинамического потенциала  $F$  по  $V$  и  $T$ . Поэтому все они строго удовлетворяют обычным соотношениям термодинамики. Поправки на взаимодействие зарядов вводятся непосредственно в  $F$  и, следовательно, не нарушают термодинамической согласованности.

**3. Жидкая плазма.** Когда ионные остовы занимают почти весь свободный объем, то понятие свободных электронов становится неправомерным, а саму плазму следует считать жидкой. Такое вещество традиционно описывают в ячеечном приближении. Вокруг каждого ядра берут сферу, эквивалентную объёму атомной ячейки. Внутри одной ячейки все термодинамические функции искусственно разбиваются на аддитивные компоненты: электронную, ядерную и излучение.

Электроны в такой ячейке описывают с помощью приближений самосогласованного потенциала. Простейшей такой моделью является температурная модель Томаса-Ферми, в которой электроны описываются в квазиклассическом приближении. В диссертации использована эта модель с квантовой и обменной поправками Киржница, называемая моделью ТФП. Удобством этой модели является подобие всех уравнений по номеру элемента  $Z$ . Это позволяет рассчитать таблицы только для водорода, и в дальнейшем пользоваться ими для других  $Z$  по правилам подобия.

Необходимо также учитывать вклад колебаний ячеек как целого. В диссертации за основу взяты модели колебания электронных остовов на фоне свободных электронов по Копышеву и Калиткину. В этих работах при высокой температуре амплитуда колебаний становилась больше межатомного расстояния, что фактически означало переход от осцилляций к свободному движению ядер. В диссертации внесено существенное усовершенствование: осцилляции определяются только фоном холодных электронов. Это гарантирует отсутствие каких-либо нефизичных эффектов в термодинамике.

Уравнения модели ТФП сводятся к математической задаче нахождения собственных значений системы двух нелинейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка:

$$0 \leq r < R. \quad (2a)$$

$$\frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [rU(r)] = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} T^{\frac{3}{2}} I_{\frac{1}{2}} \left( \frac{U(r) + \mu}{T} \right),$$

$$rU(r) \Big|_{r=0} = Z, \quad U(R) = 0, \quad \frac{dU}{dr} \Big|_{r=R} = 0, \quad (2b)$$

$$\begin{aligned} & \frac{1}{r} \frac{d^2}{dr^2} [rDU(r)] - \frac{4\sqrt{2T}}{\pi} I'_{\frac{1}{2}} \left( \frac{U(r) + \mu}{T} \right) DU(r) = \\ & = \frac{4\sqrt{2T}}{\pi} \left\{ 7 \left[ I'_{\frac{1}{2}} \left( \frac{U(r) + \mu}{T} \right) \right]^2 + I_{\frac{1}{2}} \left( \frac{U(r) + \mu}{T} \right) I''_{\frac{1}{2}} \left( \frac{U(r) + \mu}{T} \right) \right\}, \end{aligned}$$

$$rDU(r) \Big|_{r=0} = 0, \quad \frac{dDU(r)}{dr} \Big|_{r=R} = 0, \quad (2c)$$

Систему требуется решать для большого набора значений  $T$  и  $V$ , чтобы рассчитать подробные таблицы термодинамических функций. При больших  $V$  уравнения системы являются жесткими, что делает задачу трудной для вычислений. Ранее такие таблицы составлялись ценой больших затрат компьютерного времени при этом накопление ошибок округления не всегда позволяло получать нужное число верных знаков.

В диссертации был построен специализированный алгоритм для решения данной задачи. Вместо традиционного метода стрельбы был выбран метод составления консервативной разностной схемы, удовлетворяющей краевым условиям. Эта разностная схема разрешалась методом дополненного вектора, в котором собственное значение трактуется как дополнительная компонента сеточной функции. Это делает задачу хорошо обусловленной в отличие от метода стрельбы. Дополненный вектор находится ньютоновскими итерациями. Применяется подход, обеспечивающий попадание нулевого приближения в область быстрой сходимости итерации. Поэтому среднее число итераций колеблется от 2 до 4. Такой алгоритм устойчивый и очень быстрый.

Для получения гарантированной математической точности производится рекуррентное сгущение сеток с оценкой погрешности и повышением точности по методу Ричардсона. Этот метод дает апостериорную асимптотически точную оценку погрешности. Сгущение сеток прекращается, когда достигается заданная точность.

Построенный алгоритм и программный комплекс оказались настолько быстрыми, что позволяют производить таблицы из 100 строк по  $T$  и 150 столбцов по  $V$  за несколько минут на портативном компьютере с процессором Intel(R) Core(TM) i7-3520M CPU @ 2.9 GHz. Такая программа пригодна не

только для однократного расчета для однократного вычисления подробных таблиц, но и для повседневных оперативных расчетов.

**Граница применимости.** При низких температурах амплитуда колебаний ионных остовов мала. При повышении температуры она увеличивается. Когда она достигает радиуса ячейки порядка  $R$ , происходит переход от жидкости в газ. Это закритический переход, и он является плавным, а не фазовым. Середина этого перехода показана на рис. 3.

Видно, что эта линия попадает в тот коридор значений  $\lg \kappa$ , где теряет применимость модель Саха. Поэтому границы применимости моделей Саха и ТФП оказываются приблизительно совпадающими. Это подтверждает наше утверждение о том, что газовую плазму надо описывать обобщенными уравнениями Саха с поправками на взаимодействие, а жидкую — моделью ТФП с учетом колебаний ионных остовов.

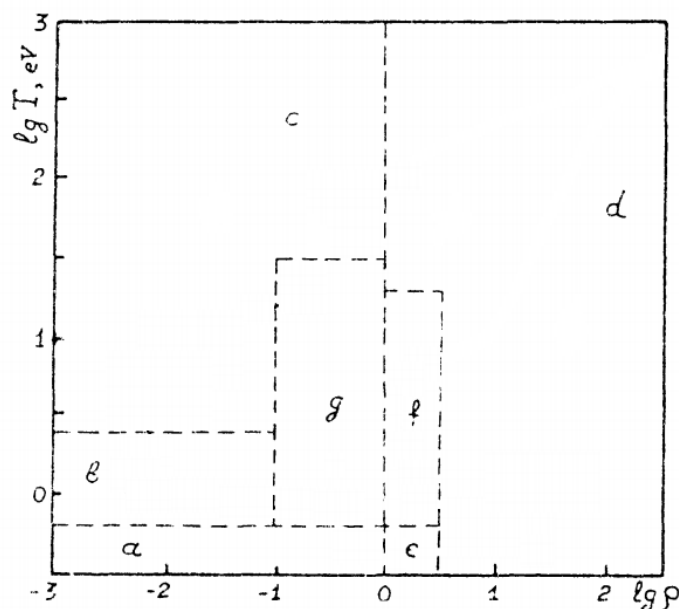


Рис. 4: «Лоскутное одеяло» моделей SESAME для Al. Штриховые линии разбивают фазовую плоскость на области разных моделей. Область  $c$  — уравнения Саха, область  $d$  — модель ТФ.

На рис. 4 приведён график применимости различных моделей в библиотеке SESAME (Лос-Аламос). На нём граница между моделями Саха и ТФ проведена вертикально, при  $\rho \sim 1 \text{ г/см}^3$  для Al. Но из рис. 3 мы видим, что граница применимости лежит наклонно и совсем при других  $T$  и  $\rho$ . Таким образом, данные из библиотеки SESAME в диапазоне больших плотностей и высоких температур ненадежны. В частности они не содержат оболочечных эффектов, которые надежно рассчитываются в данной диссертации.

**Термодинамическая согласованность.** Модель ТФП строится из условия минимума некоторого термодинамического потенциала  $F$  при фикси-

рованных  $T$  и  $V$  относительно вариации электронной плотности. Остальные термодинамические функции находятся дифференцированием термодинамического потенциала по  $V$  и  $T$ . Поэтому все термодинамические функции строго удовлетворяют обычным соотношениям термодинамики. То же относится к модели, описывающей вклад колеблющихся ионных остовов.

#### 4. Широкодиапазонное уравнение состояния.

*Лоскутное одеяло.* Широкодиапазонное или глобальное уравнение состояния пока не удалось описать с помощью единой модели. На практике используют метод лоскутного одеяла. Сравнительно узкие области описывают частными моделями, а на границах областей эти модели сшивают. При этом стараются обеспечить непрерывность и гладкость термодинамических функций (если границы не являются фазовыми переходами). Так построена лос-аламосская библиотека SESAME, где сшивается около десяти различных моделей (см. рис. 4).

Здесь строится широкодиапазонное уравнение состояния вне области фазовых переходов (то есть охватывающее газовую и жидкую плазму) с помощью всего двух моделей: модели Саха и ТФП.

Из рис. 3 видно, что в области их общей границы применимости эти модели дают близкие результаты. Остается важный вопрос — как их гладко сшить, чтобы не нарушить взаимную согласованность термодинамических функций.

*Метод сшивания.* Естественным параметром интерполяции моделей является  $\varkappa$ . Интерполируем с его помощью свободную энергию:

$$F(T, V) = \frac{\varkappa_0}{\varkappa_0 + \varkappa(T, V)} F_{\text{Саха}}(T, V) + \frac{\varkappa(T, V)}{\varkappa_0 + \varkappa(T, V)} F_{\text{ТФП}}(T, V). \quad (3)$$

Здесь  $\varkappa_0 = 0.1$ . Остальные термодинамические функции получим из  $F(T, V)$  дифференцированием по  $T$  или  $V$ :

$$P = \frac{\varkappa_0}{\varkappa_0 + \varkappa} P_{\text{Саха}} + \frac{\varkappa}{\varkappa_0 + \varkappa} P_{\text{ТФП}} + \frac{\varkappa_0 \varkappa}{(\varkappa_0 + \varkappa)^2} \frac{F_{\text{Саха}} - F_{\text{ТФП}}}{V} \frac{\partial \lg \varkappa}{\partial \lg V}, \quad (4a)$$

$$S = \frac{\varkappa_0}{\varkappa_0 + \varkappa} S_{\text{Саха}} + \frac{\varkappa}{\varkappa_0 + \varkappa} S_{\text{ТФП}} + \frac{\varkappa_0 \varkappa}{(\varkappa_0 + \varkappa)^2} \frac{F_{\text{Саха}} - F_{\text{ТФП}}}{T} \frac{\partial \lg \varkappa}{\partial \lg T}, \quad (4b)$$

$$E = \frac{\varkappa_0}{\varkappa_0 + \varkappa} E_{\text{Саха}} + \frac{\varkappa}{\varkappa_0 + \varkappa} E_{\text{ТФП}} + \frac{\varkappa_0 \varkappa}{(\varkappa_0 + \varkappa)^2} (F_{\text{Саха}} - F_{\text{ТФП}}) \frac{\partial \lg \varkappa}{\partial \lg T}. \quad (4c)$$

Интерполяция (4) дает согласованность всех термодинамических функций. Сами термодинамические функции будут непрерывно зависеть от  $T$  и  $V$ .

Описанный метод пригоден, если каждая модель продолжает давать качественно разумные результаты далеко за границами своей области применимости. Модели Саха и ТФП являются такими.

**Сравнение с библиотекой *SESAME*** Для сравнения качества нашего широкодиапазонного состояния с другими моделями мы взяли наилучшую по современным понятиям библиотеку *SESAME*. Была произведена проверка, насколько её термодинамические функции  $P(\rho, T)$  и  $E(\rho, T)$  удовлетворяют термодинамическому соотношению

$$\frac{\partial E}{\partial V} = T \frac{\partial P}{\partial T} - P, \quad V = \frac{1}{\rho}. \quad (5)$$

(Напомним, что у нас это соотношение выполняется точно.) На рис. 5 показана проверка соотношения (5) для  $\text{Cu}$  в библиотеке *SESAME*. Белый фон принят для участков, где правая и левая части (5) отличаются не более чем на 3%. Такое отличие примерно соответствует точности интерполяции и может считаться незначимым. Чёрный фон соответствует отличиям в 2 и более раз, то есть, грубейшим нарушением термодинамической согласованности.

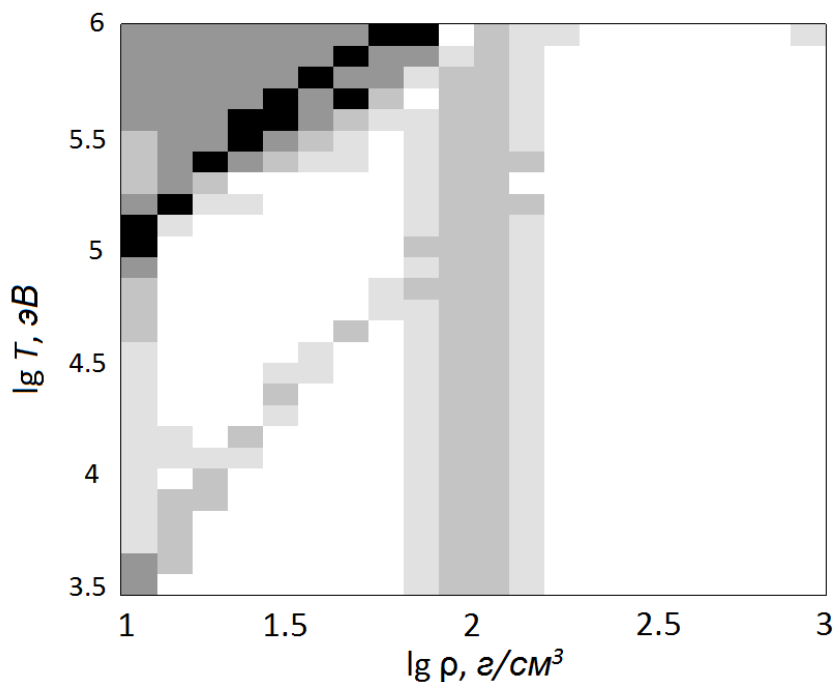


Рис. 5: Нарушение термодинамического соотношения (5) в библиотеке *SESAME* на примере  $\text{Cu}$ . Нарушение менее 3% — белый фон, 3 – 10% светло серый, 10-30% — серый, свыше 30 – 100% — темно серый, свыше 100% — черный.

Верхний угол рисунка отчеркнут черной линией. Нетрудно опознать её как линию склейки моделей типа Саха (для газовой области) и типа Томаса-Ферми (для жидкой плазмы). Грубое нарушение термодинамического соотношения (5) на этой линии показывает очень плохое качество склейки указанных моделей.

Ниже линии склейки, где используется модель типа ТФ, около двух третей занято белым фоном. На этих участках имеется хорошая термодина-

мическая согласованность. Однако и в этой области есть участки, где несогласованность превышает 10%

Вызывает удивление серьёзная термодинамическая несогласованность в области газовой плазмы. Там рассогласованность превышает всюду 10% причем в большей части области она более 30%, а местами отличие доходит почти до 2 раз! Это указывает на термодинамическую несогласованность самой модели, принятой в данной области.

Из сказанного видно, что в библиотеке SESAME, во-первых, часть использованных моделей не является термодинамически согласованной, причем несогласованность может оказываться большой. Во-вторых, склейка этих моделей выполняется с сильным нарушением термодинамической согласованности. Всё это показывает кардинальные преимущества тех методов построения уравнения состояния плазмы, которые предложены в диссертации.

**Ударные адиабаты.** Измерения в области экстремальных состояний производятся, в основном, с помощью ударных сжатий. Поэтому теоретический расчет ударных адиабат представляет особый интерес. В диссертации разработан быстрый алгоритм расчета ударных адиабат по широкодиапазонному уравнению состояния плазмы. Метод основан на численном решении уравнения Гюгонио

$$E(T, V) = E_0 + 0.5(P(T, V) + P_0)(V_0 - V). \quad (6)$$

Здесь  $P_0$ ,  $E_0$ ,  $V_0$  — характеристики несжатого вещества (состояние перед фронтом волны), а  $P$ ,  $V$ ,  $E$  — состояние за фронтом волны. Последние определяются по таблицам широкодиапазонного уравнения состояния плазмы.

**Главные ударные адиабаты металлов.** Главными называют ударные адиабаты, начальным состоянием которых является несжатое холодное твердое тело. Есть несколько металлов, особенно подробно исследованных экспериментально. В первую очередь это Al, Fe, Cu и Pb. На рис. 6, показана ударная адиабата железа в переменных температура — сжатие, рассчитанная по различным моделям. Модель ТФП даёт плавную линию с участком прямого и обратного хода. Она не содержит никаких осцилляций, так как модель не учитывает оболочечную структуру атома. Модель Саха содержит четкие осцилляции. Верхняя обусловлена  $K$ -оболочкой, средняя —  $L$ -оболочкой, а нижняя —  $M$ -оболочкой и наружными электронами. Широкодиапазонное уравнение состояния в верхней части совпадает с моделью Саха и содержит все эти осцилляции, а в нижней части переходит в модель ТФП. Дополнительный учет вклада излучения меняет поведение верхней части кривой, но оболочечные эффекты остаются хорошо видимыми.

Сравнение с ударно-волновыми экспериментами удобно проводить в скоростных переменных:  $D$  — скорость ударной волны,  $U$  — массовая скорость. Оно представлено на рис. 7. Видно, что эксперименты выходят на



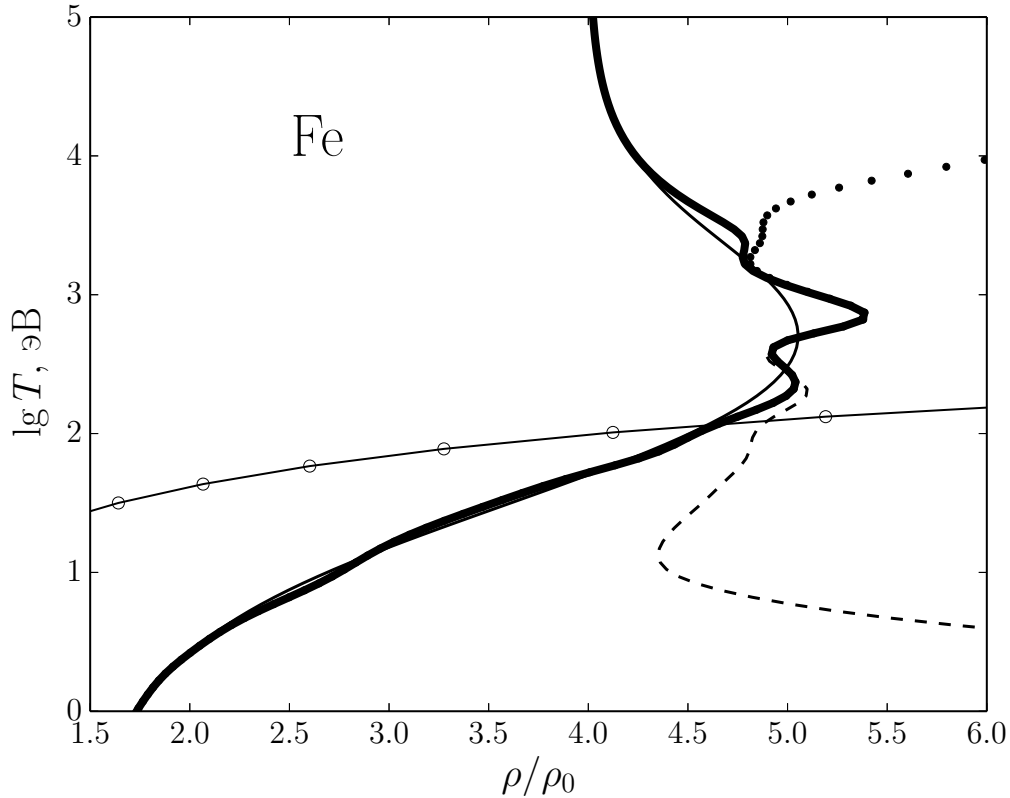


Рис. 6: Главная ударная адиабата Fe. Тонкая сплошная линия — модель ТФП, тонкий пунктир — модель Саха. Жирная линия — интерполяция с  $\kappa_0 = 0.1$ . Жирный пунктир — учет излучения. Кружками маркирована линия испарения.

теоретическую кривую уже при  $D \approx 20$  км/, что соответствует давлению  $P \approx 20$  Мбар. Поскольку при построении теории не использовались никакие подгоночные параметры, такое совпадение можно считать отличным.

В диссертации также исследуются адиабаты Al, Cu и Pb. Адиабата для меди очень близка к железу. Атом свинца содержит гораздо больше оболочек, так что число осцилляций на его ударной адиабате больше. Атом алюминия содержит всего две осцилляции, соответствующие  $K$  и  $L$  оболочкам. Отметим, что все оболочечные эффекты относятся к газовому состоянию плазмы, а ниже кривой испарения осцилляций нет.

**4. Методы аппроксимации гладких функций.** В главе рассмотрены два метода аппроксимации многократно дифференцируемых непериодических функций рядами Фурье. Дано приложение этих методов к проблеме аппроксимации уравнения состояния в жидкой плазме.

*Метод двойного периода* был предложен Калиткиным. В нём непериодическая функция  $u(x)$ , заданная на отрезке  $[\pi/2; \pi/2]$ , раскладывается

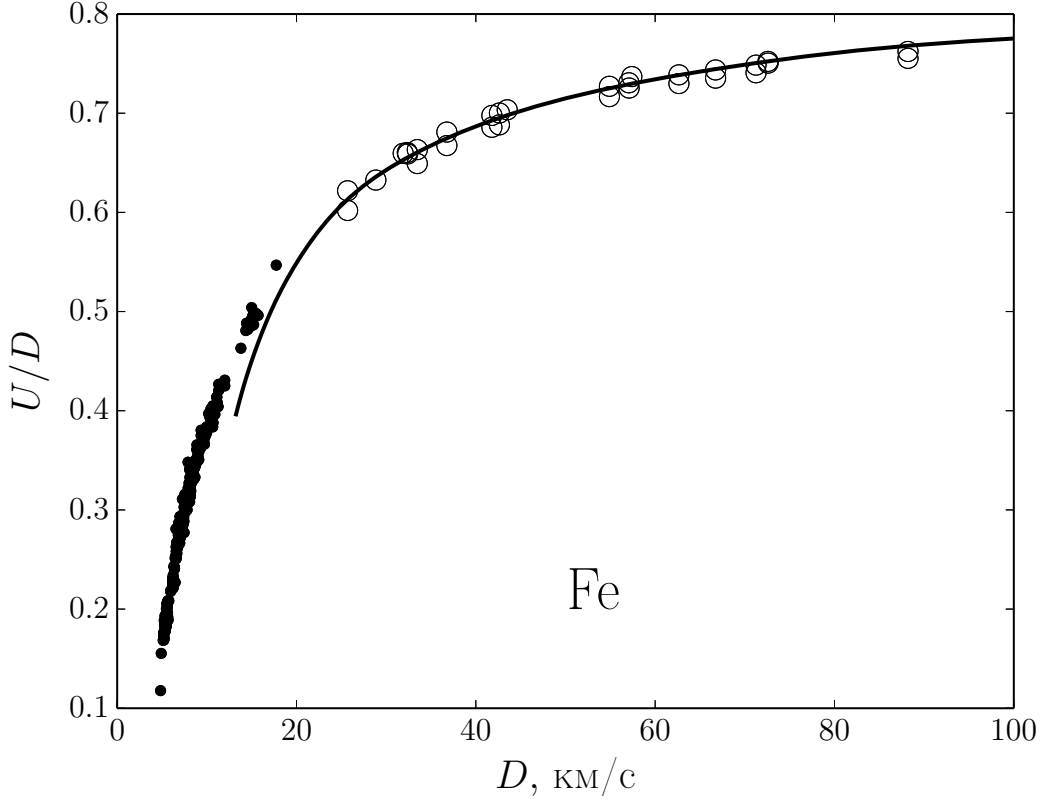


Рис. 7: Главная ударная адиабата Fe в скоростных переменных. Кривая — данная теория. Эксперименты на взрывчатках — жирные точки, в ядерных взрывах — светлые кружки.

по двум подсистемам:  $u(x) \approx \Phi(x)$ , где

$$\Phi_{N,M}(x) = \sum_{n=0}^{2N} c_n \phi_n(x) + \sum_{m=1}^M c_{m+2N} \psi_m(x), \quad (7)$$

Первая подсистема содержит только четные гармоники, подключаемые в расчет парами синус и косинус:

$$\{\phi_n(x)\}_{n=0}^{2N} = \{1, \sin 2x, \cos 2x, \sin 4x, \cos 4x, \dots, \sin 2Nx, \cos 2Nx\}. \quad (8)$$

Вторая подсистема содержит только нечетные гармоники, и они подключаются в расчет поодиночке:

$$\{\psi_m(x)\}_{m=1}^M = \{\sin x, \cos x, \sin 3x, \dots\}. \quad (9)$$

Первая сумма в (7) является разложением в обычный ряд Фурье, а каждый член второй суммы эквивалентен повышению на единицу гладкости периодического продолжения  $u(x)$ . Тем самым повышается скорость сходимости первой суммы.

В диссертации исследована обусловленность этого метода и найдены оптимальные параметры  $N$  и  $M$ , даны рекомендации для практического применения.



3. При особо простом поведении  $u(x)$  допустимо  $M = 4$  и более, а при особо большом количестве экстремумов  $M = 1$ .

Таковы оптимальные параметры метода двойного периода.

Метод двойного периода обобщается на двумерные задачи. При этом структура матрицы Грама усложняется, и её обусловленность резко ухудшается.

*Нечётное продолжение* было предложено Ланцошем. В нём вместо  $u(x)$ ,  $x \in [0; \pi]$  рассматривается функция

$$v(x) = u(x) - \left[ \frac{u(\pi) - u(0)}{\pi} x + u(0) \right]. \quad (11)$$

Четное продолжение  $u(x)$  на отрезок  $[-\pi; 0]$  непрерывно, но имеет разрывную первую производную. Поэтому его ряд Фурье сходится довольно медленно. Нечётное продолжение  $v(x)$  на  $[-\pi; 0]$  непрерывно вместе с  $v'(x)$ , а разрывна лишь  $v''(x)$ , поэтому ряд Фурье для  $v(x)$  сходится существенно быстрее. Описанный метод удобен тем, что разложение производится по ортогональной системе функций (обычный ряд Фурье). Это обеспечивает идеальную обусловленность метода.

В диссертации рассмотрено два обобщения этого метода. Первое — непосредственно обобщение на двумерный случай  $u(x, y)$ ,  $0 \leq x, y \leq \pi$ . В этом случае построено вычитание граничных значений с помощью линейных поверхностей и преобразования к функции  $w(x, y)$ , обращающейся в нуль на границах квадрата  $[0; \pi] \times [0; \pi]$ . Эта функция нечетно продолжается на квадрат  $[-\pi; \pi] \times [-\pi; \pi]$  с сохранением непрерывности первых производных. Поэтому  $w(x, y)$  разлагается в достаточно быстро сходящийся двумерный тригонометрический ряд Фурье (причем только по синусам). Этот простой и хорошо обусловленный алгоритм полезен для практики.

Двумерное нечетное продолжение имеет одно важное преимущество. В нём очень малы коэффициенты Фурье, соответствующие произведению двух высокочастотных гармоник. Это позволяет отбросить такие коэффициенты. Было доказано, что оптимальным является следующее обрезание двойной суммы:

$$w(x, y) = \sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^{N/n} c_{nm} \sin nx \sin my. \quad (12)$$

Это позволяет хранить не  $N^2$  коэффициентов разложения, а  $N \log N$ . Погрешность такой аппроксимации равна:

$$\delta_{L_2} = \frac{\sqrt{1 + (2p + 1) \ln(N + 1)}}{(2p + 1)(N + 1)^{p+1/2}}. \quad (13)$$

Второе обобщение возможно для одномерной  $u(x)$ , если известны граничные значения производных  $u^{(q)}(0)$  и  $u^{(q)}(\pi)$  для всех  $0 \leq q \leq p$ . В этом случае строится такая  $r(x)$ , чтобы  $v(x) = u(x) - r(x)$  на границе обращалась в нуль вместе со своими производными до  $v^p(x)$  включительно. Следует продолжить  $v(x)$  на вторую половину периода с четностью, противоположной  $p$ . Тогда  $v(x)$  разлагается в ряд Фурье с погрешностью  $\delta_{L2} = O(N^{-(p+5/2)})$ .

Все теоретические выводы о сходимости и погрешности полученных методов подкреплены примерами расчетов на тестовых функциях с различными параметрами.

Отметим также, что все предложенные методы пригодны для экстраполяции  $u(x)$  за пределы отрезка её задания, но лишь на расстояние заметно меньшее длины этого отрезка.

**Аппроксимации термодинамических функций** строились для жидкой плазмы, рассчитанной по модели ТФП для  $Z = 1$ :

1. Кривые холодного сжатия, то есть функции  $P(V)$ ,  $E(V)$ ,  $\mu(V)$ ,  $DP(V)$ ,  $DE(V)$ ,  $D\mu(V)$  при  $T = 0$  в диапазоне  $10^{-4} \leq V \leq 10^{11}$ . Это знакопостоянные функции, меняющиеся на много порядков. Поэтому зависимости  $\lg P$  (и другие) от  $\lg V$  аппроксимировались методом двойного периода. Оптимальные параметры для всех кривых оказались одинаковыми:  $N = 5$ ,  $M = 4$  (15 коэффициентов). Были вычислены коэффициенты, обеспечивающие точность логарифмов не хуже  $1.1 \cdot 10^{-4}$ , что означает 0.025% для самих функций. Полученные аппроксимации сравнивались с разложением по многочленам Чебышева  $T_n(\lg V)$ , при том же числе коэффициентов. Точность метода двойного периода оказалась примерно в 10 раз выше. Это убедительно показывает его преимущество.

2. При  $T > 0$  аппроксимировались только логарифмы знакопостоянных термодинамических функций:  $\lg P$ ,  $\lg E$ ,  $\lg S$ ,  $\lg(-DP)$ ,  $\lg(DS)$ ,  $\lg(-D\mu)$ . Это функции от  $\lg T$  и  $\lg V$  в диапазонах  $-4 \leq \lg V \leq 11$  и  $-5 \leq \lg T \leq 3$ . Аппроксимация производилась двумерным методом двойного периода. Оптимальные параметры для каждой функции и по каждой переменной оказались неодинаковыми, а полное число коэффициентов разложения достигало  $\sim 900$ . Это обеспечивало точность не хуже  $4 \cdot 10^{-4}$ , что означает 0.1% для самих функций. Знакопеременную величину  $\mu$  при этом нетрудно восстановить по аппроксимированному значению давления  $P$ . Вопрос о знакопеременной величине  $DE$  существенно сложнее.

3. Для холодных кривых были также построены специальные аппроксимации нелогарифмического вида. Они основаны на том, что  $1/P(V)$ ,  $1/E(V)$  и т.п. разлагаются в ряды по степеням радиуса атомной ячейки  $R \sim V^{1/3}$ . Преимуществом таких разложений является то, что они без потери точности экстраполируются на любые значения  $V \in [0; \infty]$ . Точность

такого метода уступала методу двойного периода, но при этом использовалось меньшее число коэффициентов.

Все описанные аппроксимации хорошо обеспечивают требования практических приложений.

**5. Программный комплекс ТЕФИС.** Все описанные модели и алгоритмы были реализованы и включены в программный комплекс ТЕФИС, развиваемый группой Калиткина. На данный момент ТЕФИС содержит в себе базу экспериментальных данных по свойствам вещества в экстремальном состоянии, а также программы реализующие расчеты этих свойств по различным моделям. Архитектура комплекса ТЕФИС показана на рис. 8. В

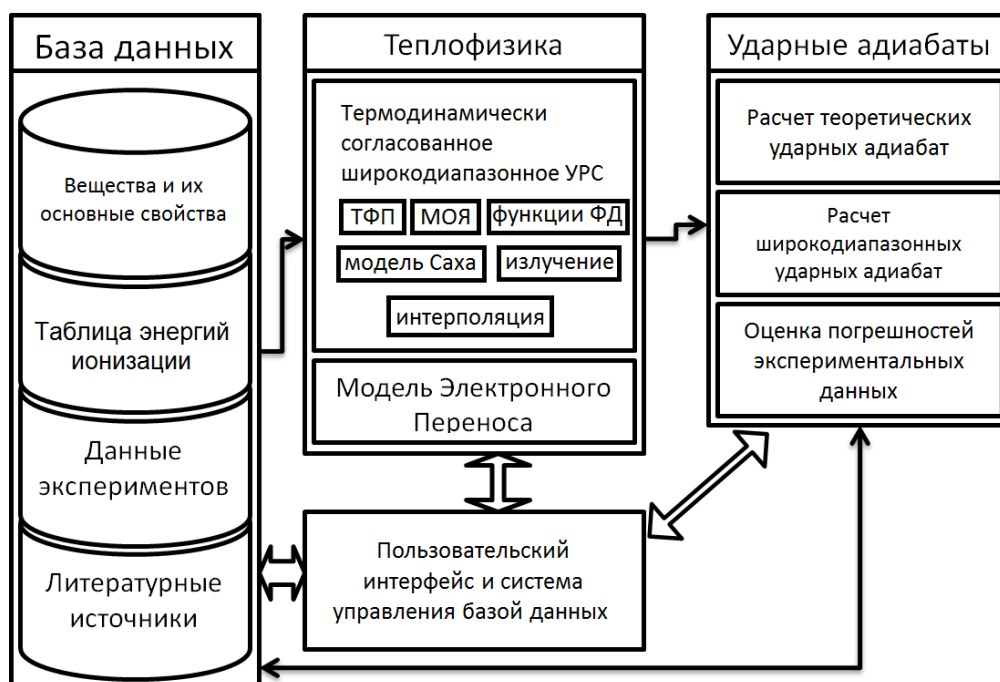


Рис. 8: Компонентная диаграмма программного комплекса ТЕФИС

данной работе были составлены и включены в комплекс ТЕФИС две библиотеки подпрограмм: GLP и SmAp.

**Библиотека GLP** (Gas-Liquid Plasma) содержит программу расчета термодинамики жидкой плазмы по модели Томаса-Ферми с квантовой и обменной поправками для холодного и горячего вещества, программу расчета термодинамики газовой плазмы по модели ионизационного равновесия, программу расчета широкодиапазонного термодинамически согласованного уравнения состояния, программу расчета ударных адиабат, а также вспомогательную программу расчета специальных функций Ферми-Дирака и их комбинаций. Все программы реализованы на языке C++, который сочетает в себе преимущества языков высокого уровня с высокой производительностью.

**Библиотека SmAp** (Smooth Approximations) содержит программы аппроксимации методом двойного периода для функций одной и двух пере-

менных, программы аппроксимации методом четно-нечетных продолжений, программы построения специальных аппроксимаций нулевых изотерм модели ТФП. Эти программы реализованы на языке Matlab с использованием комплекса GNU Octave (свободно распространяемая система для математических вычислений).

## Основные результаты

- Построена и обоснована новая модель взаимодействия заряженных частиц в плазме. Ее включение в обобщенное уравнение ионизационного равновесия позволило далеко расширить область применимости модели газовой плазмы в сторону низких температур и сверхвысоких плотностей и разумно количественно описать явление ионизации сжатием при нулевой температуре.
- Разработан сверхбыстрый специализированный алгоритм решения уравнений Томаса-Ферми с квантовыми и обменными поправками. На его основе написана программа для расчета таблиц термодинамических функций жидкой плазмы.
- Разработан метод интерполяции по разным моделям, сохраняющий строгую термодинамическую согласованность давления, энергии и энтропии. С его помощью построено широкодиапазонное термодинамическое уравнение состояния, одновременно описывающее газовую и жидкую плазму. Разработан алгоритм для расчета такого уравнения состояния и ударных адиабат. Выполнены расчеты ударных адиабат некоторых металлов и получено хорошее согласие с экспериментами при давлениях  $P \geq 20$  Мбар.
- Разработано два метода для аппроксимации гладких непериодических функций одного и двух аргументов рядами Фурье. Это метод двойного периода и метод четно-нечетных продолжений. Найдены оптимальные параметры этих методов. Построены аппроксимации термодинамических функций жидкой плазмы, рекомендуемые в качестве справочных данных, имеющие точность до 0.1%.
- Составлены программы для решения уравнений статистической модели атома с квантовой и обменной поправками. Модернизированы программы для решения обобщенных уравнений ионизационного равновесия в газовой плазме. Составлены программы для расчета широкодиапазонного уравнения состояния, а также программы расчета ударных адиабат. Эти программы объединены в автоматизированный программный комплекс.

## Публикации автора по теме диссертации

1. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, Широкодиапазонное уравнение состояния газовой и жидкой плазмы // Матем. моделирование, **27**:4 (2015), 31 – 49
2. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, Обобщение уравнений Саха на жидкую плазму // ДАН Физика, **457**:2 (2014), 157 – 161
3. *Р.В. Голованов, Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, Нечётное продолжение для фурье-аппроксимации непериодических функций // Матем. моделирование, **25**:5 (2013), 67 – 84
4. *Р.В. Голованов, К.И. Луцкий*, Вычисление интегральной функции Ферми–Дирака // Матем. моделирование, **24**:2 (2012), 129 – 138
5. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, Метод нечетного продолжения для фурье-аппроксимации непериодических функций // ДАН, **441**:1 (2011), 19 – 23
6. *К.И. Луцкий*, Обусловленность метода двойного периода // Матем. моделирование, **23**:8 (2011), 89 – 96
7. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, Аппроксимация гладких поверхностей методом двойного периода // Матем. моделирование, **22**:2 (2010), 64 – 68
8. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, Прецизионная аппроксимация квантово-статистических кривых холодного сжатия // Матем. моделирование, **20**:6 (2008), 111 – 118
9. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий*, Оптимальные параметры метода двойного периода // Матем. моделирование, **19**:1 (2007), 57 – 68
10. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий* Выбор параметров метода двойного периода. // Сборник трудов XI Всероссийской школы-семинара “Современные проблемы математического моделирования”, 2005, с. 181 – 187.
11. *Н.Н. Калиткин, К.И. Луцкий* Аппроксимация и экстраполяция функций, заданных на неравномерной сетке. Метод двойного периода // Сборник трудов X Всероссийской школы-семинара «Современные проблемы математического моделирования», Абрау-Дюрсо, 2004, с. 156 – 161.