



ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 54 за 2021 г.



ISSN 2071-2898 (Print)  
ISSN 2071-2901 (Online)

**А.С. Болдарев, О.Г. Ольховская,**  
**В.В. Валько, В.С. Соловьёва**

Термодинамические модели  
газовых смесей и их  
применение в  
гидродинамических расчетах

**Рекомендуемая форма библиографической ссылки:** Термодинамические модели газовых смесей и их применение в гидродинамических расчетах / А.С. Болдарев [и др.] // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2021. № 54. 18 с. <https://doi.org/10.20948/prepr-2021-54>  
<https://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2021-54>

О р д е н а Л е н и н а  
И Н С Т И Т У Т П Р И К Л А Д Н О Й М А Т Е М А Т И К И  
и м е н и М . В . К е л д ы ш а  
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

А . С . Б о л д а р е в , О . Г . О л ь х о в с к а я ,  
В . В . В а л ь к о , В . С . С о л о в ь е в а

Т е р м о д и н а м и ч е с к и е м о д е л и г а з о в ы х  
с м е с е й и и х п р и м е н е н и е  
в г и д р о д и н а м и ч е с к и х р а с ч е т а х

М о с к в а — 2021

*Болдарев А. С., Ольховская О. Г., Валько В. В., Соловьева В. С.*

## **Термодинамические модели газовых смесей и их применение в гидродинамических расчетах**

В работе рассмотрен подход, позволяющий получить термодинамическую модель смеси газов по известным термодинамическим свойствам компонент. Рассматриваются модели взаимопроникающих и взаимно вытесняющих компонент. Проведено тестирование модели взаимопроникающих компонент на основе сравнения свойств воздуха и смеси газов, соответствующей воздуху по составу. В качестве примера гидродинамического расчета с использованием модели взаимопроникающих компонент проведено моделирование электромагнитного сжатия сборки смешанного состава (металл и полимер). Результаты моделирования несколько лучше соответствуют экспериментальным данным, чем прежние расчеты с использованием модели преобладающей компоненты.

**Ключевые слова:** гидродинамика, термодинамическое замыкание, смесь, Z-пинч, сборка смешанного состава

*Alexey Sergeevich Boldarev, Olga Gurgenovna Olkhovskaya,  
Viktor Vasilievich Val'ko, Valentina Sergeevna Solov'eva*

## **Thermodynamic models of gas mixtures for computational fluid dynamics**

An approach is considered that allows to obtain a thermodynamic model of a gas mixture when the thermodynamic properties of its components are given. Models of interpenetrating and mutually displacing components are considered. The model of interpenetrating components was tested on the basis of comparing the properties of air and a mixture of gases corresponding to air by its composition. As an example of hydrodynamic modelling using a model of interpenetrating components, the electromagnetic compression of an array of mixed composition (metal and polymer) was computed. The modelling results are in slightly better agreement with the experimental data than previous computations using the dominant component model.

**Key words:** hydrodynamics, thermodynamic completion, mixture, Z-pinch, mixed composition array

Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 18-29-21005 мк.

# 1 Введение

При решении гидродинамических задач о течении многокомпонентных смесей часто рассматривается подход, когда для каждой компоненты смеси решается отдельное уравнение неразрывности, но уравнения импульса и энергии общие для всей смеси. Это предполагает, что между компонентами смеси имеет место механическое (так как они движутся с общей скоростью) и термодинамическое равновесие.

Модели, связанные с отказом от термодинамического равновесия между компонентами, также могут рассматриваться, но они требуют решения отдельного уравнения энергии для каждой компоненты. Это делает бессмысленной постановку задачи о термодинамических свойствах смеси. Для термодинамического замыкания такой модели требуются лишь уравнения состояния отдельных компонент.

Для термодинамически равновесных смесей замыкание гидродинамической модели требует задания уравнения состояния (вернее, термодинамической модели) всей смеси. То есть при заданных значениях массовых концентраций всех компонент смеси и двух произвольных термодинамических параметров (например, плотности  $\rho$  и удельной внутренней энергии  $\varepsilon$ ) должно быть возможно вычислить все остальные термодинамические параметры (температуру  $T$ , давление  $P$  и т. д.). При этом предполагаются известными термодинамические свойства каждой компоненты в отдельности.

Пусть смесь состоит из  $N$  компонент, параметры  $i$ -й компоненты,  $i = 1, \dots, N$ , будем обозначать нижним индексом  $i$ , например,  $T_i$ ,  $P_i$  и т. д. Массовой концентрацией  $\alpha_i$  будем называть отношение массы  $i$ -й компоненты к полной массе смеси. Очевидно, что

$$\sum_{i=1}^N \alpha_i = 1.$$

Рассмотрим два возможных варианта модели смеси.

## 1.1 Взаимопроникающие компоненты

Модель относится к смесям газов, когда для любого макроскопического объема в нем присутствуют все компоненты в соотношении, определяемом массовыми концентрациями  $\alpha_i$ . Фактически предполагается, что каждая из компонент заполняет объем, совершенно не испытывая влияния других компонент, находящаяся в том же объеме.

В этом случае справедливо соотношение

$$\rho_i = \alpha_i \rho, \tag{1}$$

причем  $\rho_i$  — это истинная плотность  $i$ -й компоненты, которую можно подставлять в ее уравнение состояния.

Предположение об отсутствии взаимодействия между компонентами позволяет сформулировать следующие условия:

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varepsilon_i, \quad (2)$$

$$P = \sum_{i=1}^N P_i. \quad (3)$$

Вообще говоря, такое предположение выглядит не слишком обоснованным — коль скоро мы отказываемся (вообще говоря) от термодинамической модели идеального газа для каждой из компонент, мы тем самым признаем необходимость учета взаимодействия молекул компоненты друг с другом, а тогда пренебрежение взаимодействием между молекулами различных компонент выглядит неестественно. Однако учет взаимодействия компонент друг с другом привел бы к тому, что термодинамика смеси не сводилась бы к термодинамическим моделям отдельных компонент. Поэтому будем предполагать справедливыми соотношения (2)–(3).

Наконец, условие термодинамического равновесия компонент означает равенство их температур

$$T_i = T, \quad i = 1, \dots, N. \quad (4)$$

## 1.2 Взаимно вытесняющие компоненты

Модель предполагает, что любой контрольный объем, занятый смесью, может быть поделен на достаточно мелкие (но все же макроскопические) части, занимаемые каждая своей компонентой. Это может иметь место, если, например, в газе имеются включения жидкой или твердой фазы, тем не менее формально описываемой как газ. В этом случае (1) уже не будет справедливо, так как отдельная компонента и вся смесь занимают разные объемы. Вместо  $N$  соотношений (1) теперь справедливо одно соотношение

$$\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{\rho_i} = \frac{1}{\rho}. \quad (5)$$

Также остается справедливым равенство (2).

Механическое и термодинамическое равновесие компонент приводит к соотношениям

$$P_i = P, \quad T_i = T, \quad i = 1, \dots, N. \quad (6)$$

## 2 Реализация термодинамических моделей

Для замыкания соотношений при гидродинамическом расчете требуется некоторый набор термодинамических функций. Будем считать, что термодинамическая модель отдельной компоненты описывается набором функций

$$\begin{aligned} P &= P(\rho, T), & \varepsilon &= \varepsilon(\rho, T), \\ P &= P(\rho, \varepsilon), & T &= T(\rho, \varepsilon), \\ \varepsilon &= \varepsilon(\rho, P), & T &= T(\rho, P). \end{aligned} \tag{7}$$

Функции считаются заданными в конструктивном смысле, то есть наличие, например, функции  $P = P(\rho, T)$  в термодинамической модели означает существование алгоритма (по возможности эффективного) расчета давления  $P$  по заданным плотности  $\rho$  и температуре  $T$  (и не предполагает, вообще говоря, возможности эффективного вычисления  $\rho$  по  $P$  и  $T$ , а также других формальных алгебраических или дифференциальных следствий существования функции  $P(\rho, T)$ ). Набор функций (7) соответствует набору виртуальных функций в классе, описывающем свойства вещества в программном комплексе MARPLE [1].

Соответственно, набор функций (7) может считаться термодинамической моделью всей смеси, если всегда предполагать заданными (помимо двух аргументов каждой из функций) значения концентраций  $\alpha_i$  всех компонент смеси:

$$\begin{aligned} P &= P(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T), & \varepsilon &= \varepsilon(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T), \\ P &= P(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, \varepsilon), & T &= T(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, \varepsilon), \\ \varepsilon &= \varepsilon(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, P), & T &= T(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, P). \end{aligned} \tag{8}$$

Задача состоит в получении соотношений (8) для смеси  $N$  компонент (в конструктивном смысле) по заданным (конструктивно) соотношениям (7) для каждой из  $N$  компонент смеси. Эти соотношения должны быть получены в рамках обеих сформулированных выше моделей, то есть для взаимопроникающих (см. 1.1) и взаимно вытесняющих (1.2) компонент.

### 2.1 Модель взаимопроникающих компонент

Модель определяется соотношениями (1), (2), (3) и (4). Из этого следует, что

$$P(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T) = \sum_{i=1}^N P_i(\alpha_i \rho, T), \tag{9}$$

$$\varepsilon(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varepsilon_i(\alpha_i \rho, T). \quad (10)$$

При заданных  $\rho, \varepsilon$  температура  $T = T(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, \varepsilon)$  может быть найдена как решение уравнения

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varepsilon_i(\alpha_i \rho, T), \quad (11)$$

после чего давление  $P = P(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, \varepsilon)$  можно найти по формуле (9). Уравнение (11) рекомендуется решать методом деления отрезка пополам, в качестве первоначального отрезка взяв

$$\left[ \min_{i=1, \dots, N} T_i(\alpha_i \rho, \varepsilon); \max_{i=1, \dots, N} T_i(\alpha_i \rho, \varepsilon) \right].$$

Существование решения (11) на этом отрезке следует из соображения, что  $T_i(\alpha_i \rho, \varepsilon)$  — это температура компонент в предположении, что каждая имеет внутреннюю энергию  $\varepsilon$ . Удельная внутренняя энергия всей смеси при этом будет также  $\varepsilon$ , и, предоставив систему (адиабатически) самой себе, мы теоретически дождемся установления термодинамического равновесия, когда температуры всех компонент сравняются. Очевидно, эта общая температура и будет решением (11), и она не может оказаться меньше минимальной или больше максимальной первоначальной температуры компонент.

Полагая также верным  $c_v > 0$  для всех компонент, мы можем сказать, что для  $T = \min T_i(\alpha_i \rho, \varepsilon)$  правая часть (11) будет меньше или равна левой, а для  $T = \max T_i(\alpha_i \rho, \varepsilon)$  наоборот. В результате получаем следующий итерационный процесс:

1.  $T_0 := \min_{i=1, \dots, N} T_i(\alpha_i \rho, \varepsilon)$  и  $T_1 := \max_{i=1, \dots, N} T_i(\alpha_i \rho, \varepsilon)$ .
2.  $T := (T_0 + T_1)/2$  и  $\delta := T_1 - T$ .
3. Если  $\delta/T < \delta_0$  (погрешность меньше заданной), то закончить и считать  $T$  результатом.
4.  $r := \varepsilon - \sum_{i=1}^N \alpha_i \varepsilon_i(\alpha_i \rho, T)$ .
5. Если  $r < 0$ , то  $T_1 := T$ , в противном случае  $T_0 := T$ .
6. Перейти к п. 2.

Аналогично при заданных  $\rho$  и  $P$  температура  $T = T(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, P)$  находится из уравнения

$$P = \sum_{i=1}^N P_i(\alpha_i \rho, T), \quad (12)$$

после чего удельная внутренняя энергия  $\varepsilon = \varepsilon(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, P)$  может быть найдена по (10). Уравнение (12) также может быть решено методом деления отрезка пополам, в качестве начального отрезка можно взять

$$\left[ \min_{i=1, \dots, N} T_i \left( \alpha_i \rho, \frac{P}{N} \right); \max_{i=1, \dots, N} T_i \left( \alpha_i \rho, \frac{P}{N} \right) \right],$$

существование решения обосновывается мысленным экспериментом с изобарным установлением термодинамического равновесия в системе, первоначально состоящей из компонент под давлением  $P/N$  каждая. Соответственно, итерационный процесс будет отличаться только вычислением невязки в п. 4:

$$r := P - \sum_{i=1}^N P_i(\alpha_i \rho, T).$$

## 2.2 Модель взаимно вытесняющих компонент

Модель определяется соотношениями (5), (2), (6). Задачу получения соотношений (8) можно было бы свести к решению системы алгебраических уравнений относительно переменных  $P$ ,  $T$ , если бы в дополнение к (7) были бы известны свойства компонент при заданных параметрах  $P$ ,  $T$ :

$$\varepsilon = \varepsilon(P, T), \quad \rho = \rho(P, T).$$

В этом случае для известной пары параметров  $\rho$ ,  $T$  величину  $P(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T)$  можно было бы найти, решая уравнение

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{\rho_i(P, T)} \quad (13)$$

относительно  $P$ , затем вычислить  $\varepsilon(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T)$  как

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varepsilon_i(P, T). \quad (14)$$

Для заданной пары параметров  $\rho$ ,  $P$  нужно было бы решать уравнение (13) относительно  $T$ , затем находить внутреннюю энергию по (14). Наконец, для



заданной пары переменных  $\rho$ ,  $\varepsilon$  можно было бы решить систему двух уравнений (13)–(14) относительно двух неизвестных  $P$ ,  $T$ .

Однако функции, принимающие пару величин  $P$ ,  $T$  как входные параметры, не предусмотрены интерфейсом класса термодинамических свойств. Поэтому задача разрешения зависимостей (8) сводится к алгебраическим системам несколько большей размерности.

При заданных параметрах  $\rho$ ,  $T$  можно найти  $\rho_i$  и  $P$  ( $i = 1, \dots, N$ , всего  $N + 1$  величина) как решение системы

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{\rho_i}, \quad P_i(\rho_i, T) = P, \quad i = 1, \dots, N. \quad (15)$$

Давление  $P(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T)$  — это значение  $P$ , найденное как решение системы. Удельная внутренняя энергия  $\varepsilon(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, T)$  вычисляется по формуле

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varepsilon_i(\rho_i, T),$$

после того как  $\rho_i$  также станут известны из решения системы (15).

При заданных параметрах  $\rho$ ,  $P$  система  $N + 1$  уравнения

$$\frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{\rho_i}, \quad T_i(\rho_i, P) = T, \quad i = 1, \dots, N, \quad (16)$$

решаемая относительно  $\rho_i$  и  $T$ , дает способ вычисления  $T(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, P)$ . После этого энергия  $\varepsilon(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, P)$  вычисляется как

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varepsilon_i(\rho_i, P).$$

При известных  $\rho$ ,  $\varepsilon$  нужно решать систему  $N + 2$  уравнений

$$\varepsilon = \sum_{i=1}^N \alpha_i \varepsilon_i(\rho_i, T), \quad \frac{1}{\rho} = \sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{\rho_i}, \quad P_i(\rho_i, T) = P, \quad i = 1, \dots, N, \quad (17)$$

относительно неизвестных  $\rho_i$ ,  $T$ ,  $P$ . Найденные значения  $T$  и  $P$  представляют собой  $T(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, \varepsilon)$  и  $P(\alpha_1, \dots, \alpha_N, \rho, \varepsilon)$ .

### 3 Тестирование модели взаимопроникающих компонент

Модель взаимопроникающих компонент реализована в программном комплексе MARPLE [1] в форме класса *MHD\_Matter\_Properties\_MIXTURE*.

С целью проверки реализации модели взаимопроникающих компонент был проведен следующий эксперимент. Сравнивались результаты термодинамических вычислений для воздуха и для смеси основных его компонент (азот, кислород и аргон), взятых в соответствующих их содержанию в воздухе концентрациях. В качестве термодинамической модели воздуха, азота, кислорода и аргона были взяты таблицы *kesr*, подготовленные с помощью программного комплекса THERMOS [2, 3].

Тестирование модели заключалось в сравнении вычислений по формулам (7) для воздуха с вычислениями по (8) для смеси компонент с концентрациями

$$\alpha_{\text{N}_2} = 0.7557, \quad \alpha_{\text{O}_2} = 0.2315, \quad \alpha_{\text{Ar}} = 0.0128.$$

При этом для корректного сравнения должны всегда сравниваться значения той или иной термодинамической величины, вычисленные по идентичным исходным данным. Формулы (7) и (8) содержат, как видно, три группы функций — от независимых переменных  $(\rho, T)$ , от переменных  $(\rho, \varepsilon)$  и от переменных  $(\rho, P)$ . Соответственно, проводится три теста, в которых вычисляются по (7) и (8) и сравниваются между собой зависимые величины для одних и тех же значений соответствующей пары независимых величин.

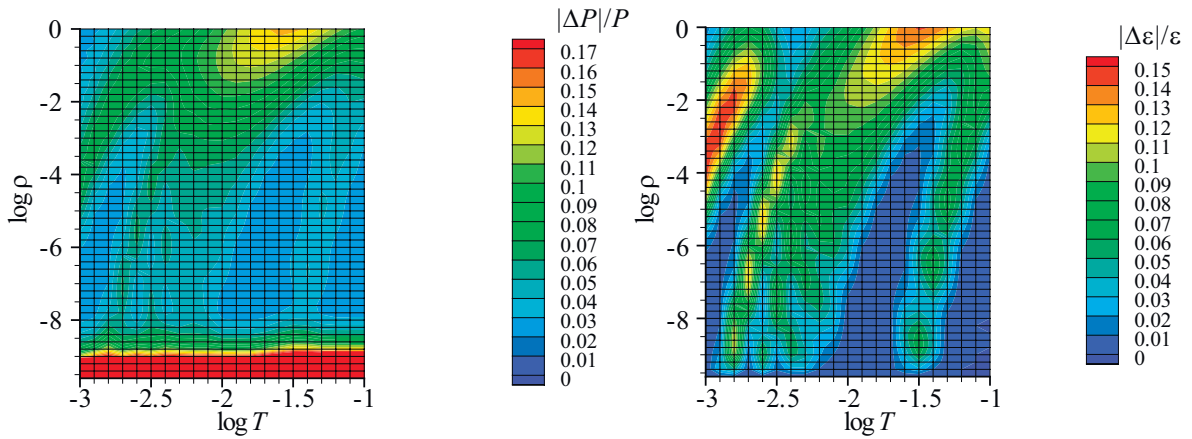


Рис. 1: Первый тест: сравнение  $P(\rho_j, T_i)$  и  $\varepsilon(\rho_j, T_i)$ , вычисленных по моделям (7) и (8).

Таблицы *kesr* первоначально имеют в качестве независимых величин пару  $(\rho, T)$ , поэтому в качестве реперных точек  $(\rho_j, T_i)$  для первого теста естественно взять узловые точки самой таблицы. Для каждой узловой точки таблицы вычисляются значения  $P(\rho_j, T_i)$ ,  $\varepsilon(\rho_j, T_i)$  по моделям (7) и (8) (реализованным через таблицы *kesr* для воздуха и его компонентов соответственно), результаты сравниваются между собой. Результаты такого сравнения приведены на рис. 1 в виде изолиний модуля разности значений величин, рассчитанных по обоим моделям, отнесенного к значению, рассчитанному по модели (7).

По осям отложены значения плотности и температуры в логарифмическом масштабе, прямоугольная сетка соответствует узловым значениям таблицы.

Сравнение значений давления показывает заметные расхождения при низких плотностях. Это объясняется тем, что в модели смеси происходит обращение к термодинамическим функциям отдельных компонент с плотностями соответствующих компонент, см. (9), (10), а эти плотности оказываются ниже первого узлового значения таблицы (узловые значения таблиц воздуха и его компонент одинаковы). Поэтому в данном случае термодинамические функции компонент возвращают физически необоснованные значения из т. н. «обрамления» таблицы. Ожидать разумного совпадения результатов можно лишь в области, где и плотность смеси  $\rho$ , и плотности отдельных компонент  $\alpha_i \rho$  находятся в области допустимых параметров таблицы. Так как концентрация аргона порядка 0.01, сравнение целесообразно проводить при плотностях на 2 порядка выше минимальной, это соответствует одиннадцатой узловой точке таблицы. Впрочем, влияние аргона на результаты, скорее всего, невелико, поэтому приличное совпадение начинается уже после шестой точки, т. е. начиная с плотностей в 10 раз больше нижней границы таблицы.

Если исключить из рассмотрения область низких плотностей, то наблюдается в общем удовлетворительное соответствие результатов двух моделей, различия составляют проценты. Тем не менее в максимуме расхождение доходит до 14% по давлению и 15% по удельной внутренней энергии. Следует также отметить, что столь большие расхождения имеют место при высоких плотностях, когда взаимодействие компонент друг с другом становится более заметным и обоснованность предположений (2)–(3) уменьшается.

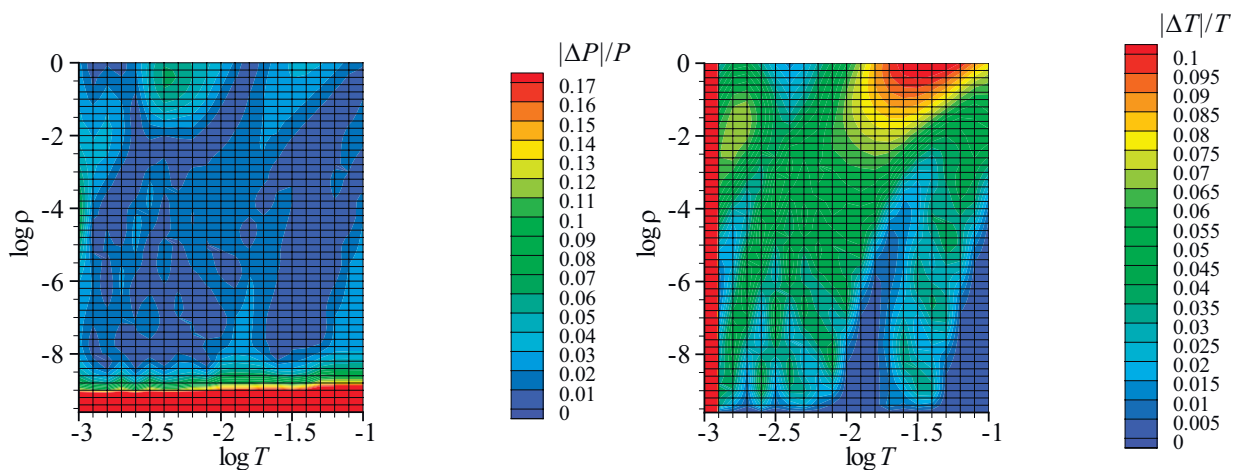


Рис. 2: Второй тест: сравнение  $P(\rho_j, \varepsilon_{ij})$  и  $T(\rho_j, \varepsilon_{ij})$ , вычисленных по моделям (7) и (8).

Во втором тесте, с парой независимых переменных  $(\rho, \varepsilon)$ , используются реперные точки

$$(\rho_j, \varepsilon_{ij}) = (\rho_j, \varepsilon(\rho_j, T_i)),$$

вычисление  $\varepsilon(\rho_j, T_i)$  проводится по модели (7), т. е. для воздуха, а не для смеси (даже когда реперная точка используется для тестирования модели смеси (8), так как необходимо обеспечить вычисления по обеим моделям для одних и тех же входных данных). Для удобства представления, однако, результаты второго теста графически представляются в координатах  $(\rho_j, T_i)$  (логарифмических). Тест заключается в вычислении для каждой реперной точки  $(\rho_j, \varepsilon_{ij})$  величин  $P(\rho_j, \varepsilon_{ij})$  и  $T(\rho_j, \varepsilon_{ij})$  по моделям (7) и (8) и сравнении результатов. Результаты представлены на рис. 2. Видно, что расхождение давлений (снова исключая область низких плотностей) не превосходит 6%, а температур — 10%. Для температур наблюдается некий артефакт в виде больших расхождений для реперных точек с минимальной температурой, это может быть также связано с выходом за пределы таблиц во время итерационного процесса (11), но в остальной области наблюдается совпадение результатов в пределах нескольких процентов.

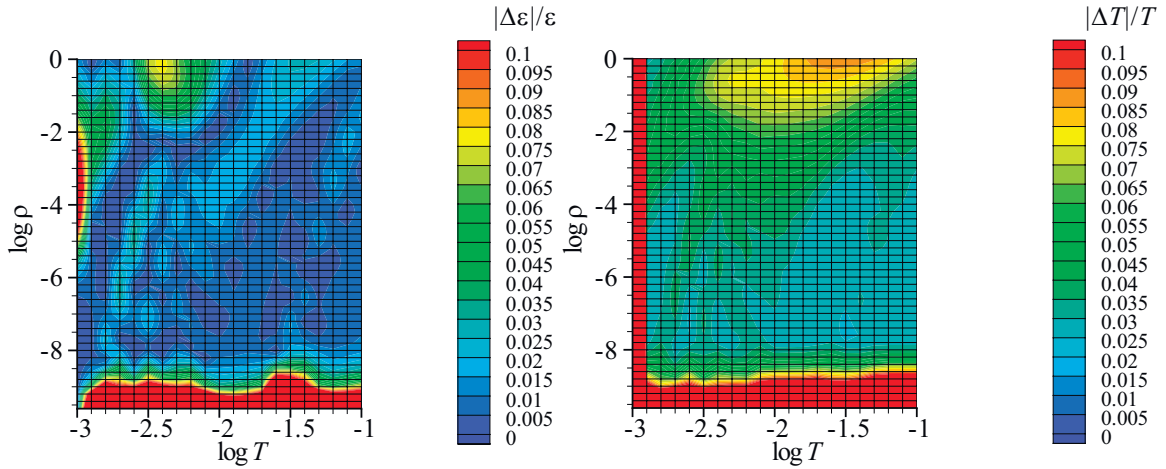


Рис. 3: Третий тест: сравнение  $\varepsilon(\rho_j, P_{ij})$  и  $T(\rho_j, P_{ij})$ , вычисленных по моделям (7) и (8).

В третьем тесте в качестве реперных точек берутся

$$(\rho_j, P_{ij}) = (\rho_j, P(\rho_j, T_i)),$$

причем вычисление  $P(\rho_j, T_i)$  проводится по модели (7). В рамках теста для каждой реперной точки вычисляются величины  $\varepsilon(\rho_j, P_{ij})$  и  $T(\rho_j, P_{ij})$  по моделям (7) и (8) и сравниваются между собой. Рис. 3 показывает удовлетворительное совпадение значений удельной внутренней энергии в областях, разумно удаленных от нижних границ таблиц (8% отклонения в максимуме).

Для значений температуры картина аналогична, с 9% расхождением в максимуме.

## 4 Пример использования модели взаимопроникающих компонент в гидродинамическом расчете

Дополнительная верификация модели выполнялась посредством использования ее в расчете имплозии двухкаскадных вложенныхборок смешанного состава [4]. Довольно сложная модель имплозииборок, реализованная в программном комплексе MARPLE-3D [1], включает в себя, помимо двухтемпературной магнитной гидродинамики, также диссипативные процессы (теплопроводность, диффузию магнитного поля) и радиационный перенос энергии. Поэтому свойства вещества, необходимые для замыкания системы уравнений, должны помимо термодинамических соотношений (7) включать в себя выражения для среднего заряда иона, коэффициентов электронной и ионной теплопроводности и проводимости

$$Z(\rho, T_e), \quad \kappa_e(\rho, T_e), \quad \kappa_i(\rho, T_i), \quad \sigma(\rho, T_e),$$

а также оптические свойства плазмы (усредненные по Росселанду и Планку коэффициент поглощения и излучательная способность  $K_R, J_R, K_P, J_P$ ). В случае смеси значения этих параметров должны быть выражены через соответствующие значения параметров для компонент этой смеси (и их концентрации).

Средний заряд определяется следующим образом:

$$Z = \frac{\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i Z_i}{A_i}}{\sum_{i=1}^N \frac{\alpha_i}{A_i}},$$

где  $A_i$  — атомный вес  $i$ -й компоненты смеси. При известном среднем заряде коэффициенты теплопроводности и проводимость плазмы можно рассчитать по формулам Спицера и закону Видемана — Франца [5].

Оптические свойства смеси вычисляются по формуле

$$K_R = \sum_{i=1}^N \alpha_i K_{Ri},$$

аналогично для  $J_R, K_P$  и  $J_P$ .

## 4.1 Моделирование имплозии двухкаскадных вложенныхборок смешанного состава

В настоящее время на сильноточном генераторе АНГАРА-5-1 в ФГУП ТРИНИТИ [6] активно проводятся эксперименты по сжатию токонесущих плазменных нагрузок, называемых лайнерами, для получения мощных источников мягкого рентгеновского излучения (МРИ,  $h\nu > 100$  эВ) на основе Z-пинча. В качестве перспективной конструкции лайнера, позволяющей получать короткие и мощные импульсы МРИ с максимальным значением пиковой мощности до 10 ТВт, предложены многокаскадные сборки смешанного состава, состоящие из пластиковых волокон и металлических проволок [4]. Нами проведено моделирование имплозии вложенной сборки, соответствующее условиям эксперимента ТРИНИТИ № 6462: 16 полипропиленовых (PP) волокон во внешнем каскаде, 40 вольфрамовых (W) проволок во внутреннем каскаде. Моделирование выполнялось в приближении радиационной магнитной газодинамики (РМГД) средствами кода MARPLE-3D [1]. Вычисления проведены с помощью гибридного суперкомпьютера К-60, установленного в Центре коллективного пользования ИПМ им. М. В. Келдыша РАН.

Основной целью моделирования было получение данных по слиянию отдельных плазменных струй с волокон внешнего каскада в сплошную оболочку, стабилизирующую сжатие внутреннего каскада. Исходя из этой цели при моделировании были приняты следующие упрощения:

- не учитывалась аксиальная неоднородность плазмообразования,
- использовалась диффузионная модель лучистого теплообмена и «серое» (однотемпературное) приближение, т. е. осреднение оптических свойств плазмы по всему спектру,
- использовалась модельная формула для тока генератора

$$I(t) = I_0 \sin^2 \left( \frac{\pi}{2T} t \right),$$

амплитуда  $I_0 = 4$  МА, время нарастания  $T = 100$  нс.

Данные по скорости плазмообразования для материалов сборки взяты из работы [7].

При моделировании разноматериальныхборок необходимо рассчитывать термодинамическое состояние многокомпонентных смесей, поскольку во время имплозии происходит перемешивание веществ двух каскадов (вольфрама и полипропилена). Для каждого из этих веществ использовались табличные уравнения состояния, подготовленные с помощью программного комплекса

THERMOS [2, 3]. Построение таблиц для составных материалов (смеси химических элементов) производится в приближении равенства плотностей электронов  $N_e$ . Данное приближение вполне применимо при высоких ионизациях вещества, но с понижением температуры следует использовать либо более общие подходы, например, исходить из равенства полных химических потенциалов, либо эмпирические и полуэмпирические модели.

Расчет воспроизвел основные результаты эксперимента:

1. объединение плазменных струй с внешнего каскада (пластиковая волоконная сборка) вокруг внутреннего каскада (W-сборки);
2. азимутальная однородность плазмы внутреннего каскада на стадии его финального сжатия;
3. уменьшение отставшей плазмы вокруг пинча;
4. как следствие п. 3, выросла пиковая мощность МРИ, при этом длительность импульса соответствует экспериментальной, особенно короткий задний фронт.

На рис. 4 представлены рассчитанные распределения плотности плазмы внутри сборки. На рисунках изображена 1/8 часть сборки (5 W-проволок и 2 PP-волокна). Показаны следующие характерные моменты имплозии двухкаскадныхборок:

1. начало плазмообразования, появление струй плазмы (40 нс от начала импульса тока);
2. слияние струй плазмы внешнего каскада в квазиоднородную оболочку (60 нс);
3. финальное сжатие плазмы, соответствующее моменту генерации импульса МРИ (120 нс); в этот момент скорость сжатия плазмы W-сборки составила  $2.7\text{--}4.0 \cdot 10^7$  см/с, температура центрального пинча достигала 120 эВ.

Справа — результаты, полученные с использованием описанной в данной работе модели взаимодействующих компонент, слева — по упрощенной модели преобладающей компоненты (в каждой ячейке применяется уравнение состояния того вещества, массовая концентрация которого максимальна).

Проведенное сравнение показало, что новая модель уравнения состояния лучше передает наблюдаемые в экспериментах характерные особенности сжатия вложенныхборок: формирование квазиоднородной оболочки из материала внешнего каскада (момент  $t = 60$  нс) и уменьшение отставших масс (момент  $t = 120$  нс).

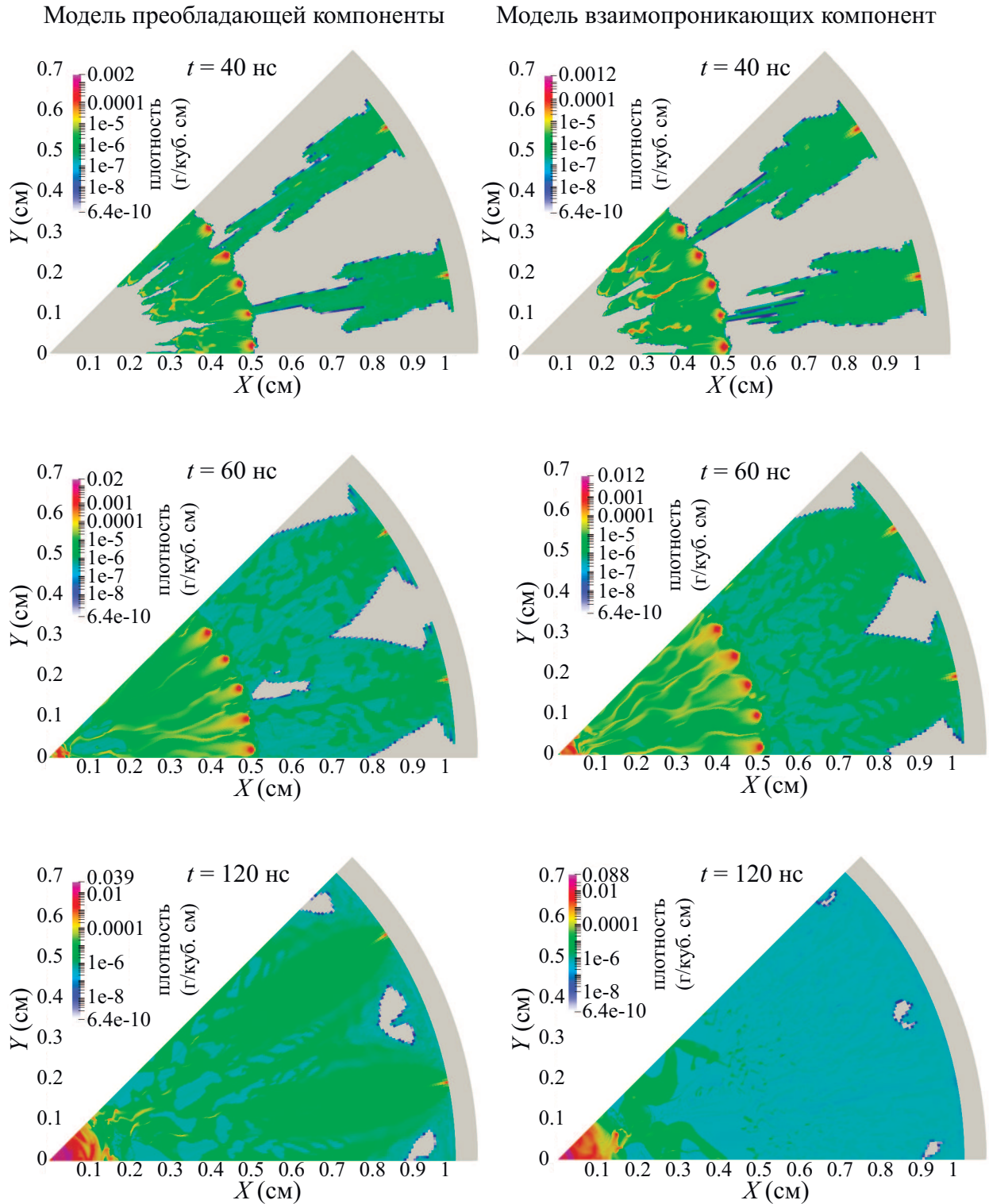


Рис. 4: Результаты моделирования эксперимента № 6462 — распределения плотности плазмы внутри сборки в плоскости  $(x, y)$ , моменты времени отсчитываются от начала импульса тока.



## 5 Выводы

1. Разработана модель термодинамических свойств смеси газов на основе предположения термодинамического и механического равновесия между компонентами смеси и пренебрежения взаимодействием компонент друг с другом. Приведены алгоритмы вычисления термодинамических параметров смеси.
2. Модель взаимопроникающих компонент протестирована путем сравнения термодинамических свойств воздуха (для которых имеются таблицы) и эквивалентной ему по составу смеси газов (для свойств каждого из которых также имеются таблицы). Сравнение показало совпадение рассчитанных свойств в пределах 15%. Максимальные расхождения наблюдаются при высоких значениях плотности, что может объясняться взаимодействием компонент друг с другом, в то время как для умеренных значений плотности наблюдается лучшее соответствие. В то же время при использовании табличных уравнений состояния для компонент смеси необходимо следить за тем, чтобы термодинамические параметры каждой компоненты попадали в зону покрытия таблицы.
3. Разработанная модель взаимопроникающих компонент использована для моделирования Z-пинчей на основе токовой имплозии многокаскадныхборок смешанного состава. Проведенное сравнение показало, что новая модель уравнения состояния лучше передает наблюдаемые в экспериментах характерные особенности сжатия вложенныхборок: формирование квазиоднородной оболочки из материала внешнего каскада и уменьшение отставших масс.

## Список литературы

- [1] Гасилов В. А., Болдарев А. С., Дьяченко С. В., Ольховская О. Г., Карташева Е. Л., Болдырев С. Н., Багдасаров Г. А., Гасилова И. В., Бояров М. С., Шмыров В. А. Пакет прикладных программ MARPLE3D для моделирования на высокопроизводительных ЭВМ импульсной магнитоускоренной плазмы // Математическое моделирование. — 2012. — Т. 24, № 1. — С. 55–87.
- [2] <https://www.keldysh.ru/cgi/thermos/navigation.pl?ru,home>
- [3] Вичев И. Ю., Грушин А. С., Новиков В. Г., Соломянная А. Д. KIAM\_DB: база атомных данных для расчётов спектральных свойств плазмы. — Москва: ИПМ им. М. В. Келдыша, 2016. — 94 с. <https://keldysh.ru/e-biblio/vichev/>
- [4] Митрофанов К. Н., Александров В. В., Грицук А. Н., Браницкий А. В., Фролов И. Н., Грабовский Е. В., Сасоров П. В., Ольховская О. Г., Зайцев В. И. Исследование режимов течения плазмы при токовой имплозии двухкаскадных вложенных сборок // Физика плазмы. — 2018. — Т. 44, № 2. — С. 157–192.
- [5] Сасоров П. В., Боброва Н. А., Ольховская О. Г. Уравнения двухтемпературной магнитной гидродинамики плазмы с учетом ее замагниченности // Препринты ИПМ им. М. В. Келдыша РАН. — 2015. — № 21. — 18 с.
- [6] <https://www.trinit.ru/services/unikalnye-nauchnye-ustanovki/angara-5-1>
- [7] Митрофанов К. Н., Александров В. В., Грицук А. Н., Грабовский Е. В., Фролов И. Н., Лаухин Я. Н., Брешков С. С. Особенности сжатия металлизированных волоконныхборок // Физика плазмы. — 2017. — Т. 43, № 2. — С. 134–157.

# Содержание

1	Введение . . . . .	3
1.1	Взаимопроникающие компоненты . . . . .	3
1.2	Взаимно вытесняющие компоненты . . . . .	4
2	Реализация термодинамических моделей . . . . .	5
2.1	Модель взаимопроникающих компонент . . . . .	5
2.2	Модель взаимно вытесняющих компонент . . . . .	7
3	Тестирование модели взаимопроникающих компонент . . . . .	8
4	Пример использования модели взаимопроникающих компонент в гидродинамическом расчете . . . . .	12
4.1	Моделирование имплозии двухкаскадных вложенных сборок смешанного состава . . . . .	13
5	Выводы . . . . .	16
	Список литературы . . . . .	17