

01

©1995

## ПАРАМЕТРИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ СРЕДЫ С СИЛЬНЫМ МЕЖЧАСТИЧНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

*В.А.Дубовицкий, Ю.Г.Красников, Г.А.Павлов*

Термодинамический анализ сред с сильным межчастичным (кулоновским) взаимодействием в широком диапазоне параметров представляет собой актуальную проблему. В работе предложен метод построения набора изотерм среды, описываемой замкнутой многокомпонентной термодинамической моделью. Метод основан на выборе адаптирующейся невырожденной системы координат в расширенном пространстве термодинамических переменных и дает возможность рассчитывать изотермы как в области термодинамической устойчивости, так и вне ее. Последнее обстоятельство позволяет эффективно выполнять широкодиапазонные термодинамические расчеты, исследовать фазовые переходы первого рода, определять количество фаз и кривые сосуществования. Применяемые в литературе (см., например, [1,2]) численные методы термодинамического расчета сводятся к прямым итерационным процессам и плохо приспособлены для этой цели. С одной стороны, это связано с тем, что при наличии точек ветвления решений — составов, ответственных за явление фазового перехода, происходит вырождение уравнений и возникает патология сходимости итераций. С другой стороны, прямые методы принципиально неинформативны для анализа неединственности.

Рассмотрим пространственно однородную замкнутую среду (плазму), состоящую из  $m$  сортов частиц, электронов, атомов, молекул, атомарных и молекулярных ионов. Состояние среды характеризуется числом частиц  $N_1, \dots, N_m$ , объемом  $v$ , давлением  $P$ , температурой  $T$ . Взаимодействуя между собой, частицы подчиняются набору линейных законов сохранения, включающих законы сохранения химических элементов и электронейтральности. Система уравнений термодинамического расчета рассмотрена, например, в [2,3]. Способы анализа данной системы уравнений, основанные на жесткой фиксации переменных решения, назовем прямыми. С точки зрения плазменного фазового перехода [4,5] представляют интерес точки ветвления составов. Численный анализ системы уравнений термодинамического расчета вблизи точки ветвления любыми прямыми итерационными

ми методами, например на основе метода Ньютона, неэффективен из-за расходимости итераций. Положение качественно изменится, если изучать изотерму не привязываясь к определенной системе координат. В самом деле, в случае типичной свободной энергии Гельмгольца среды —  $F$  матрица Якоби  $J = \partial(\partial F/\partial x)/\partial(x, v)$  имеет в точках изотермы ранг  $r$  ( $r$  — число базисных компонент среды без единицы). Поэтому по теореме о неявной функции [6] изотерма является одномерным гладким многообразием, состоящим из набора непересекающихся гладких линий — компонент связности. Поскольку при  $v \rightarrow \infty$   $F$  стремится к идеальной составляющей свободной энергии, только одна из компонент определена при всех  $v$  (“идеальная” компонента [4]). Движение вдоль компонент реализуется эффективным алгоритмом [4]. Алгоритм основан на выделении на каждом шаге из  $r + 1$  переменного  $x_1, \dots, x_r, x_{r+1} = v$  группы  $r$  базисных переменных, таких что соответствующий минор  $r$  порядка прямоугольной матрицы  $J$  обусловлен наилучшим образом. Для этого  $J$  приводится преобразованием Хаусхолдера [7] к верхнетреугольной форме  $S = QJP_\sigma^T$ , где  $Q$  — ортогональная матрица, а  $P_\sigma$  — матрица перестановок, соответствующая перестановке  $\{\sigma_1, \dots, \sigma_{r+1}\}$  чисел  $\{1, \dots, r + 1\}$ . В качестве текущих базисных переменных выберем  $x_{\sigma_1}, \dots, x_{\sigma_r}$ , а  $x_{\sigma_{r+1}}$  служит свободным параметром. После выделения базисных переменных производится варьирование  $x_{\sigma_{r+1}}$ , далее система уравнений термодинамического расчета решается методом Ньютона [7] относительно  $x_{\sigma_1}, \dots, x_{\sigma_r}$ . Хорошая обусловленность данной системы по базисным переменным гарантирует быструю сходимость итераций. Помимо выявления точек ветвления очевидным практическим преимуществом параметрического анализа является быстрое получение густой сети точек изотермы в чрезвычайно широком диапазоне параметров ( $v_{\max}/v_{\min} \sim 10^{50}$ ), чего невозможно достичь прямыми методами. Естественным ограничением применимости предложенной техники являются предположения о полноте ранга  $J$  ( $\text{rank } J = r$ ) и об эффективной вычислимости с высокой точностью первых и вторых производных  $F$ . Если  $F$  невыпукла, то параметрический метод анализа предполагает рассмотрение всех существующих компонент изотермы и для “неидеальных” компонент возникает проблема получения стартового начального условия. В вычисленных точках изотермы путем численного анализа знакоопределенности матрицы  $\partial^2 F/\partial(x, v)^2$  можно сделать заключение и о механической устойчивости системы и тем самым разбить изотерму на устойчивую и неустойчивую части.

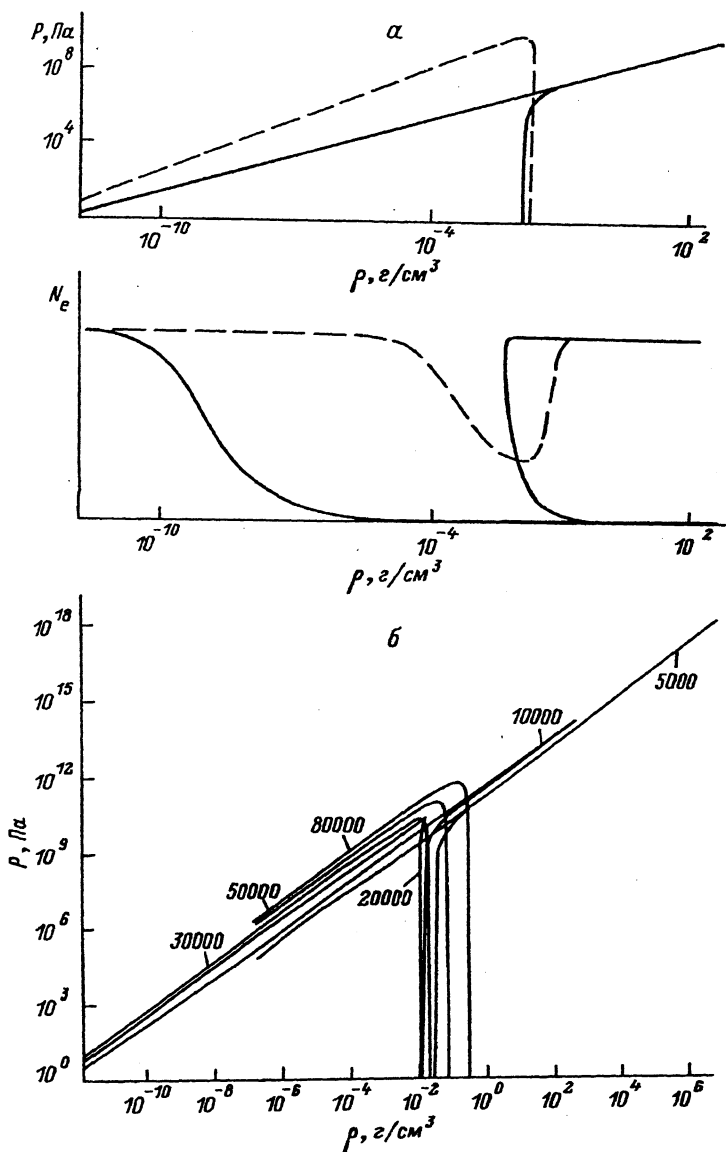


Рис. 1. Модель ДХ: а — изотерма с точками ветвления,  $T = 10\,000$  К, и без них,  $T = 30\,000$  К (пунктир); б — проекции изотерм на  $(\rho, P)$  плоскости.

Метод апробирован на известных моделях водородной плазмы  $\{e, \text{H}, \text{H}^+, \text{H}_2\}$ . Параметры индивидуальных частиц взяты из [4,8]. В приближении Дебая-Хюккеля (ДХ) [3] со статсуммами индивидуальных частиц в форме [9] проведенные расчеты показали следующее. Изотерма системы состоит из единственной компоненты, которая либо не име-

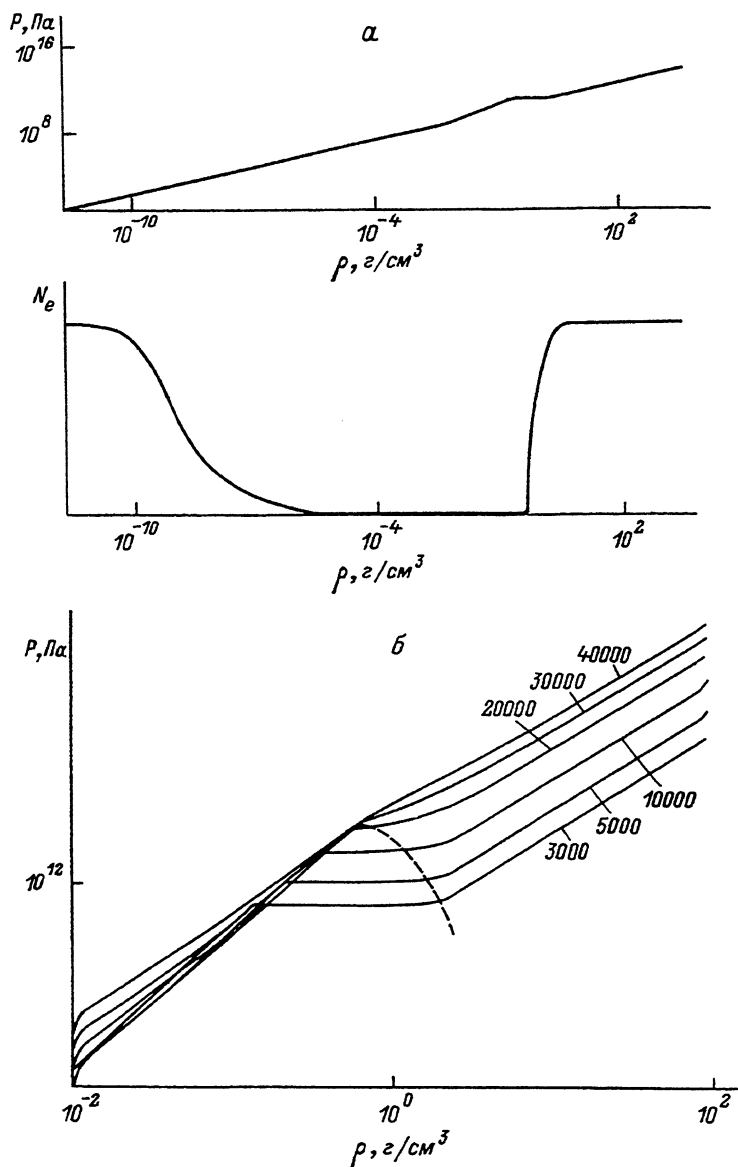


Рис. 2. Модель  $n^{5/2}$  [8]: а — изотерма с участком стационарности давления,  $T = 10\,000$  К; б — проекции изотерм на  $(\rho, P)$  плоскости.

ет точек ветвления, либо содержит один S-образный фрагмент. Проекции изотерм на плоскости  $v, N_e$  изображены на рис. 1, а. Для изотермы характерно наличие точки  $C_1$ , которая делит ее на устойчивую и неустойчивую части. При этом если изотерма не имеет точек возврата, то все ее точки диффузионно устойчивы. Поскольку приближение ДХ неприменимо при достаточно малых  $v$ , т. е. практически во

всей области  $v$  на рис. 1, то пересечение проекций, а также попадание их в область отрицательных давлений не имеют физического смысла, но демонстрируют возможности параметрического анализа.

Параметрический анализ приближения [8] выявил любопытные критические явления, представленные на рис. 2, а. При любой температуре  $T$  проекция изотермы на плоскость  $(\rho, N_e)$  имеет минимум, причем при  $v \rightarrow 0$  электронейтральные компоненты  $H$ ,  $H_2$  исчезают. Проекция изотермы на  $(\rho, P)$  плоскость, т. е. уравнение состояния, имеет в логарифмических координатах перегиб. При убывании  $T$  зона минимума свободных электронов расширяется, причем их число становится там исчезающе мало (до  $10^{-10}$  от полного). Логарифмический график  $P(\rho)$  приобретает, в свою очередь, зону почти постоянства (перепад  $10^{-3}$  значения  $P$ ), локализованную в зоне роста  $N_e$ . На рис. 2, б изображено разбиение  $(\rho, P)$  плоскости изотермами и отмечена критическая точка  $\rho = 0.6 \text{ г/см}^3$ ,  $P = 4 \cdot 10^{12} \text{ Па}$ ,  $T = 20\,000 \text{ К}$  исчезновения заметного перегиба. Пунктиром очерчена область, заполненная пологими участками изотерм. Итак, в приближении [8] реализуется фазовый переход первого рода, при котором при пересечении узкой окрестности линии квазистационарных давлений в  $P, T$  плоскости термодинамический потенциал изменяется резко, почти скачком. Этот переход можно назвать конденсацией электронов из нейтралов при сжатии. Параметры найденной критической точки реализуются в глубинных слоях Юпитера.

#### Список литературы

- [1] Furman D., Griffiths R. // Phys. Rev. A. 1978. V. 17. N 3. P. 1139.
- [2] Теплофизические свойства рабочих сред газозазадного ядерного реактора / Под ред. В.М. Иевлева. М.: Атомиздат, 1980. 304 с.
- [3] Ландау Л.Д., Лившиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. М.: Наука, 1976. 584 с.
- [4] Дубовицкий В.А., Красников Ю.Г., Павлов Г.А. // Матем. моделирование. 1993. Т. 5. № 11. С. 53.
- [5] Норман Г.Э., Старостин А.Н. // Тепл. выс. темп. 1970. Т. 8. № 2. С. 413.
- [6] Обен Ж.П., Экланд И. Прикладной нелинейный анализ. М.: Мир, 1988.
- [7] Лоусон Ч., Хенсон З. Численное решение задач метода наименьших квадратов. М.: Наука, 1986.
- [8] Красников Ю.Г. // ЖЭТФ. 1977. Т. 73. № 2. С. 516.
- [9] Ларкин А.И. // ЖЭТФ. 1960. Т. 38. № 6. С. 1896.

Московский  
физико-технический институт  
Долгопрудный  
Институт химической физики  
п. Черноголовка

Поступило в Редакцию  
16 мая 1995 г.