

Ю. С. Протасов, Ю. Ю. Протасов,
В. Д. Телех

РАЗРАБОТКА АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ НАУЧНЫХ И ИНЖЕНЕРНЫХ РАСЧЕТОВ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ, ОПТИЧЕСКИХ И ТРАНСПОРТНЫХ СВОЙСТВ ГАЗОВО-ПЛАЗМЕННЫХ АКТИВНЫХ СРЕД И КОНСТРУКЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ УСТАНОВОК

Приведены результаты исследований и разработок программных компонент, тематических баз и банков данных создаваемой автоматизированной системы научных и инженерных расчетов (АСНИР ТОТ–МГТУ “Термодинамика, оптика, транспорт”) термодинамических, оптических и транспортных свойств плазмобразующих элементов конструкционных материалов (металлов, диэлектриков, полупроводников) и газОВО-плазменных активных сред различных химического и ионизационного составов в широких диапазонах температур, плотностей и энергии квантов. Описаны структура комплекса АСНИР создаваемых программных компонент, сопряженных баз и банков данных, а также результаты численного моделирования и сравнительного анализа рассчитываемых характеристик с экспериментальными данными.

Современный этап исследований и разработок энергетических установок с концентрированным потоком энергии — плазменных и фотонных лучевых энергетических и технологических устройств и систем — характеризуется активным применением физических и математических методов их анализа и инженерной многопараметрической оптимизации, развитым математическим моделированием и элементами САПР. При этом радиационно–плазмодинамические, тепло- и электрофизические процессы в газОВО-плазменных средах и твердотельных структурах энергоустановок описываются уравнениями радиационной магнитной газодинамики, твердотельной электроники, интенсивного переноса фотонов и заряженных частиц, которые (уравнения) численно решаются на сверхскоростных ЭВМ с привлечением высоких вычислительных технологий. Для оптимального применения этих методов необходим предварительный анализ термодинамических, транспортных, оптических свойств рабочих веществ и активных сред: проводимости, теплопроводности, вязкости, коэффициентов диффузии частиц различных сортов, пробегах фотонов, частотных зависимостей коэффициентов поглощения/отражения, эмиссионных/абсорбционных спектров, коэффициентов обмена энергией между компонентами смесей

рабочих веществ, всего набора термодинамических функций и характеристик. Несмотря на многолетнюю историю исследований, объем надежных данных по термодинамическим, оптическим и переносным свойствам плазмы ограничен [1–10]. Достаточно подробные сведения о термодинамических, транспортных и оптических свойствах получены лишь для плазмы воздуха и его компонентов [1–4] в узком диапазоне параметров ($T, \rho, h\nu$); такие данные известны для некоторых газов, диэлектриков и металлов [3–9]. Значительное число теоретических работ посвящено лишь проблеме создания широкодиапазонных уравнений состояния вещества и определению термодинамических свойств веществ в экстремальных условиях [11, 12], что делает создание программных компонент автоматизированной системы научных и инженерных расчетов (АСНИР) и тематических баз и банков данных актуальным.

Целью описываемых исследований и разработок является создание АСНИР термодинамических, оптических и транспортных свойств газовой-плазменных активных сред различного химического и ионизационного состава, плазмообразующих элементов конструкционных материалов энергетических установок в широких диапазонах температур $T \sim 5 \cdot 10^3 \dots 5 \cdot 10^6$ К, плотностей $\rho \sim 10^{-4} \dots 10^2$ кг/м³ и энергии квантов $h\nu \sim 10^{-1} \dots 10^4$ эВ); далее приведены примеры программной реализации комплекса и создания соответствующих баз и банков данных по термодинамическим, оптическим и транспортным свойствам плазмы инертных газов (Ar, Xe, He, Ne, Kr), всех элементов полимерного ряда (C, H, F, N, O, Si) и наиболее употребляемых плазмообразующих веществ конструкционных материалов и активных сред энергетических установок.

Основные принципы построения АСНИР ТОТ. Знание термодинамических, оптических и транспортных (ТОТ) свойств плазмы, ее сложного химического и ионизационного состава в широком диапазоне изменения параметров плазмы в сильных радиационных полях необходимо для многочисленных сопряженных научных и технологических приложений: широкого спектра задач радиационной, газовой и плазменной динамики, физической и квантовой электроники, взаимодействия концентрированных потоков энергии с веществом разных агрегатных состояний и др. [12, 13]. Исходя из реальных потребностей численного и физического моделирования и инженерного анализа, наибольший интерес для решения этих задач представляют данные о групповом/ионизационном составе газовой-плазменных активных сред; о термодинамических характеристиках плазмы (давлении, внутренней энергии, энтальпии, энтропии) и дифференциальных термодинамиче-

ских функциях (изобарных и изохорных теплоемкостях, эффективном показателе адиабаты, скорости звука и др.); об оптических свойствах (коэффициентах поглощения в дискретном и непрерывном спектрах, интегральных коэффициентах поглощения и характерных интегральных длинах пробега излучения); о переносных (транспортных) свойствах плазмы (коэффициентах электро- и теплопроводности, диффузии, вязкости и др.).

Получение информации по каждому из этих разделов служит самостоятельной экспериментальной и расчетной задачей, а результат — создание соответствующих баз данных, совокупность которых по каждому разделу и формирует банки данных. Дополнительное требование к системе создания таких банков экспериментальных и теоретических данных — ее универсальность, так как учесть все используемые вещества и соединения, данные о которых могут потребоваться при конкретном инженерном анализе широкого спектра плазменных устройств и систем, заранее невозможно.

Задача создания АСНИР ТОТ для определения свойств плазмы сложного химического и ионизационного состава связана:

— с созданием программных компонент АСНИР для расчета оптических, переносных и термодинамических свойств многокомпонентной плазмы в широком диапазоне изменения основных ее параметров (температуры, концентрации и энергии квантов). Такая система должна удовлетворять следующим требованиям: во-первых, выполнять большое число чисто вычислительных операций (учет только элементарных радиационных процессов требует вычисления сечений и других сопряженных характеристик как минимум $\sim 10^4$ переходов); во-вторых — поддерживать достаточно объемную базу данных по квантово-механическим состояниям атомов и ионов (до 10^3 состояний на каждый ион, десятки тысяч состояний на элемент); в-третьих — быть открытой для дальнейшего развития и модификации, позволять с малыми затратами заменять или добавлять новые физические методики расчета и анализа; в-четвертых — позволять получить результаты с минимальными затратами времени;

— с генерацией энциклопедических банков данных по термодинамическим, оптическим, переносным свойствам многокомпонентной плазмы при использовании разрабатываемого комплекса программ.

В соответствии с программой исследований термодинамических, оптических и переносных свойств многокомпонентной плазмы, проводящихся в МГТУ им. Н.Э. Баумана [5, 6, 8–10], разрабатывается автоматизированная система научных и инженерных расчетов — АСНИР ТОТ. Логика построения и ее структура описываются далее.

В качестве входных данных для АСНИР ТОТ–МГТУ используются плотность, температура (или другие два независимых термодинамических параметра), элементный состав плазмы, а также энергетические уровни всех атомов и ионов, входящих в смесь. Выходными данными являются зависимости термодинамических функций, элементного/группового состава, оптических и переносных свойств для диапазона входных данных, представляемые в удобном для анализа виде.

При разработке общей структуры автоматизированной системы научных расчетов исходили из того, что она должна совмещать в себе большое количество чисто вычислительных операций и поддерживать достаточно объемные базы данных, а также быть открытой для расширения, что возможно при объектно–ориентированном подходе к построению программ.

В соответствии с принятым объектно-ориентированным подходом предмет моделирования — плазма — представлен несколькими уровнями рассмотрения/детализации: верхний уровень — это “смесь”, как совокупность составляющих ее химических элементов, характеризующаяся набором параметров (температурой, плотностью, давлением и т.д.). Следующий уровень — это “элемент” (химический), как совокупность ионов различной кратности, характеризующийся своим набором параметров (атомным номером, массой и т.д.). Далее следуют: “ион” — как совокупность возможных энергетических состояний; “состояние”, описываемое конфигурацией электронных оболочек; “оболочка”, характеризующаяся набором квантовых чисел и количеством электронов. Каждому уровню детализации соответствует базовый тип переменной — объект, объединяющий в себе данные и методы их обработки. На основе базовых объектов могут быть порождены объекты-потомки, наследующие необходимые свойства и методы предков, вносящие новые или модифицирующие старые свойства и методы, что позволяет сделать комплекс открытым для дальнейшего расширения. Структурная схема комплекса АСНИР приведена на рис. 1.

Все базовые объекты комплекса — это потомки стандартного объекта (TObject), что облегчает организацию иерархической структуры данных в виде стандартных коллекций (объект TCollection) и хранение данных в стандартных потоках. На базе модулей комплекса строится набор программ по расчету термодинамических, переносных и оптических свойств смеси из элементов, входящих в соответствующие базы данных. Для этого в программе инициализируется объект заданием химического состава, температуры и плотности; затем используются методы этого объекта для расчета того или иного параметра или вывода результатов расчета. Например, для расчета суммарного спектра

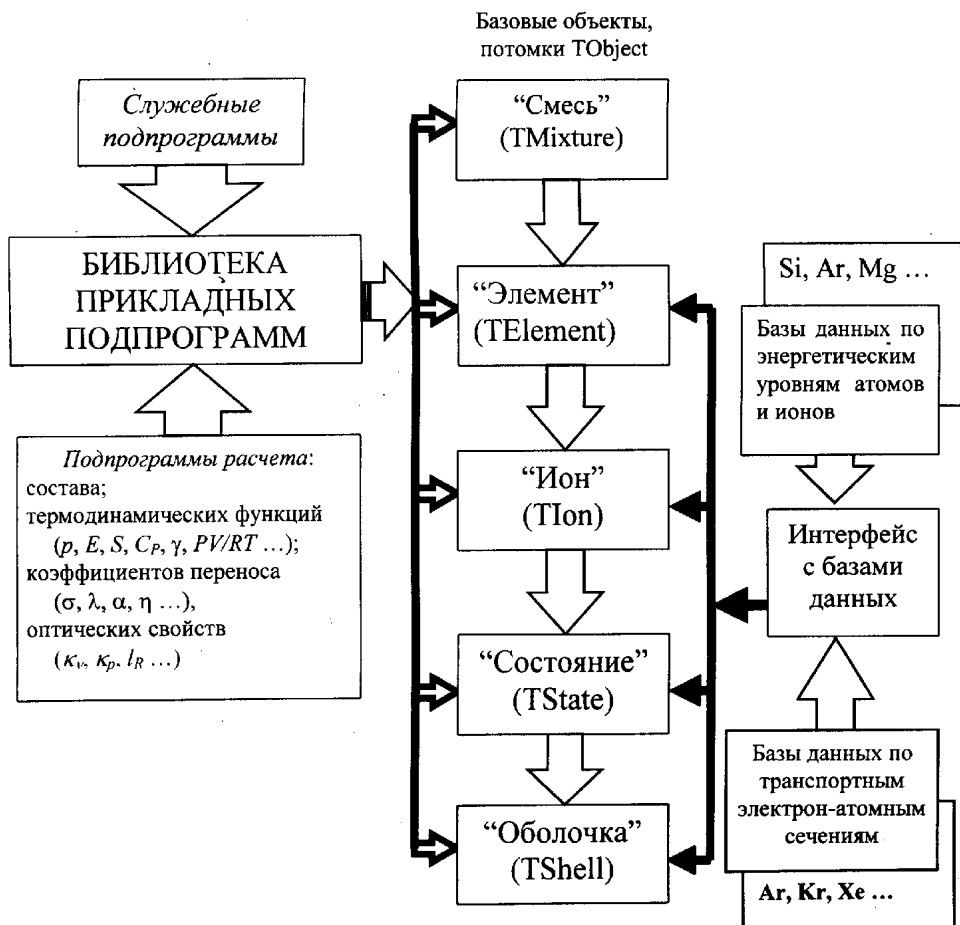


Рис. 1. Структурная схема АСНИР ТОТ-МГТУ

поглощения плазмы сложного химического состава необходима следующая информация: парциальный состав плазмы; непрерывный спектр поглощения; данные по силам осцилляторов и параметрам штарковского уширения линий в плазме.

Эта информация является входной для расчета суммарного спектра. Так как в объекте "смесь" используется метод, реализующий расчет дискретного спектра, профиля линий и наложение их на непрерывный спектр, это позволяет за один шаг проводить полномасштабные вычисления, имея в качестве входной информации только температуру (эВ), плотность (кг/м^3) и базу данных по квантово-механическим состояниям атомов и ионов, входящих в смесь. Остальные данные автоматически рассчитываются и хранятся динамически в виде полей и методов объектов комплекса.

О генерации баз и банков данных комплекса АСНИР ТОТ–МГТУ. *Базы данных по квантово-механическим состояниям атомов и ионов элементов “ТОТ–состояния”. Интерфейс АСНИР ТОТ с базами данных.*

Степень наполнения баз данных по энергетическим уровням зависит от поставленной задачи. При расчете группового/элементного состава (определение статистических сумм) достаточно ограничиться десятком низковозбужденных состояний; при определении непрерывного спектра поглощения можно также ограничиться несколькими низковозбужденными состояниями, учитывая влияние остальных интегрально [13]. Для определения же дискретного спектра непосредственно из данных по энергетическим уровням атомов и ионов необходима более обширная база данных (более точные методы расчета свойств плазмы, с учетом эффектов неидеальности, развитые данные по квантово-механическим состояниям [7, 14]). Таким образом, генерируемые базы данных должны содержать большое количество записей по энергетическим уровням каждого иона каждого рассчитываемого элемента. Создание таких баз данных связано с выполнением ряда последовательных этапов. Во-первых, обширным библиографическим поиском требуемой информации (по приближенным оценкам [15] за 40-летний период исследований было опубликовано свыше 3000 оригинальных работ по исследованию спектров и энергетических уровней атомов и ионов). Во-вторых, созданием инфологической основы БД, что подразумевает наличие требуемой информации в виде данных на бумажном носителе. В-третьих, разработкой и развитием теоретических и численных методов анализа для неизученного диапазона параметров. В-четвертых, разработкой системы управления базами данных, позволяющей оперативно вносить изменения и дополнения в БД с минимумом затрат. Информационное представление баз данных в АСНИР ТОТ основано на принятой в спектроскопии систематике уровней атомных частиц и методах ее записей и имеет самостоятельное значение, поскольку может являться обобщением накопленных данных по энергетическим уровням атомов и ионов.

Даталогическое представление информационной модели предметной области достигается благодаря интерфейсу БД с АСНИР ТОТ. При этом используется иерархическая модель данных, представляющая собой древовидную структуру, где каждому уровню детализации предметной области (плазмы) соответствует “узел” в структуре данных (рис. 2), что позволяет достигнуть независимости программного продукта от базы данных и наоборот.

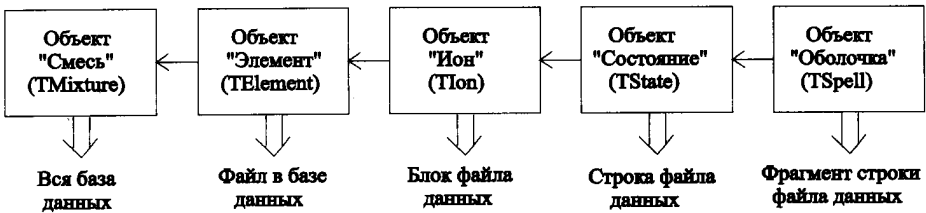
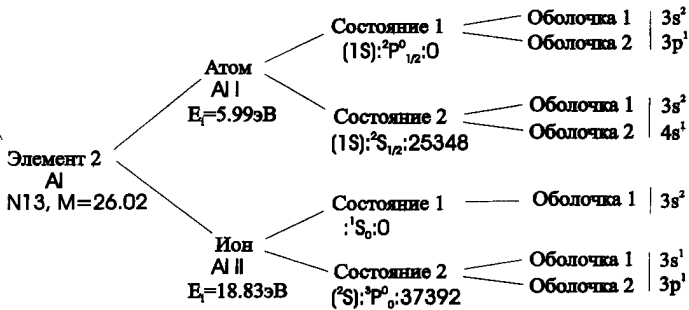
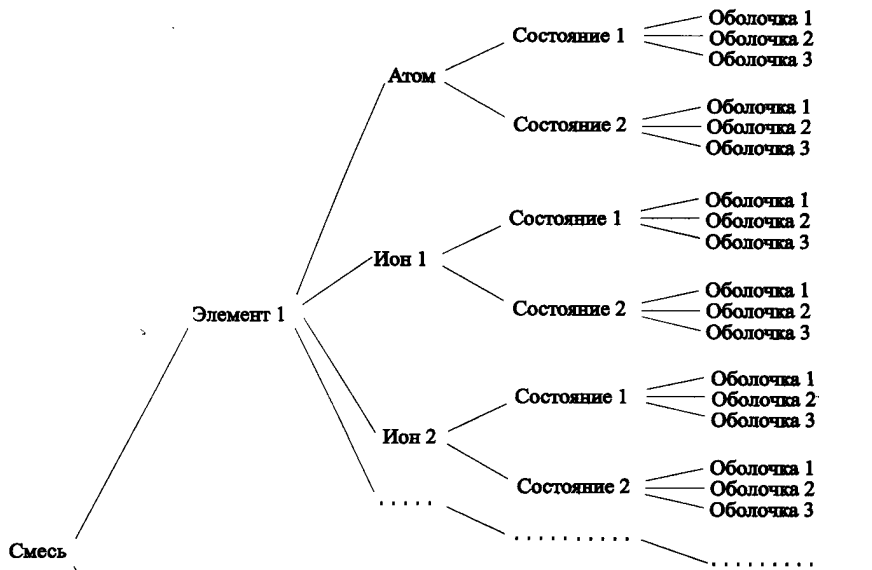


Рис. 2. Иерархическая структура базы данных по квантово-механическим состояниям атомов и ионов ("ТОТ-состояния") и ее сопряжения с базовыми объектами АСНИР — ТОТ-МГТУ; для элемента 2 показано заполнение полей БД на примере алюминия

В АСНИР ТОТ БД "ТОТ-состояния" используются для расчета параметров разрешенных дипольных переходов (сил осцилляторов, длин волн, параметров уширения), сечений фотоионизации электронных оболочек, расчета статистических сумм и, следовательно, определения ионизационного состава, термодинамических и транспортных свойств многокомпонентной атомарной плазмы. Базы данных "ТОТ-состояния"

созданы из обобщенного массива теоретических и экспериментальных работ и представляют соответствующим образом сформатированные данные в виде файла для каждого элемента от H до P, а также Ar, Mg, Ti, Cr, Mn, Fe, Ni, Cu, Ge, Kr, Mo, Xe, W. Базы данных организованы в виде структурированных текстовых файлов, каждый из которых содержит форматированную информацию по отдельному элементу. Внутри файла информация по энергетическим уровням разбита на следующие блоки: данные для атома (иона) — энергия ионизации основного состояния и смещенных термов — возбужденные состояния атома (иона). Данные по возбужденным состояниям содержат информацию по электронным оболочкам, набору квантовых чисел, энергии возбуждения.

Степень наполненности БД не менее 100 состояний для атома и первых двух ионов (как правило $\sim 10^3$) и порядка $10 \dots 100$ состояний для многозарядных ионов. В целом, формат представления данных по энергетическим уровням полностью соответствует принятому международному стандарту представления подобной информации [16, 17].

Базы данных по термодинамическим свойствам атомарной многокомпонентной плазмы сложного химического состава “ТОТ–термодинамика”.

Базы данных представляют собой набор структурированной информации в форме таблиц, графиков, а также в текстовом (ASCII) формате. Представление информации в текстовом формате наиболее целесообразно, так как делает БД действительно аппаратно- и программно-независимыми.

Базы данных “ТОТ–термодинамика” содержат сведения по ионизационному составу и термодинамическим свойствам плазмы различных элементов таблицы Менделеева (по давлению, внутренней энергии, энтропии, энтальпии, изобарной и изохорной теплоемкостям, показателям адиабаты, уравнениям состояния, скорости звука) и их смесей как функций от плотности и температур (в диапазонах плотностей от $0,0001$ до 100 кг/м^3 и температуры от 5 до $5 \cdot 10^3 \text{ кК}$) (рис. 3, 4); в доступных областях диаграммы $\rho - T$ проведено сравнение представленных расчетных результатов генерируемой базы данных с экспериментальными и теоретическими данными [10]. В основу расчета ионизационного состава и термодинамических функций плазмы положено уравнение Саха–Эккерта с учетом неидеальности плазмы в приближении Дебая–Хюккеля в большом каноническом ансамбле [7]. Статистические суммы рассчитывают, используя БД по энергетическим уровням атомов и ионов элементов, входящих в смесь, вводя экспоненциальный форм-фактор [17]. Ограничениями для использованных методик расчета служат: вырождение электронной компоненты плазмы при дальней-

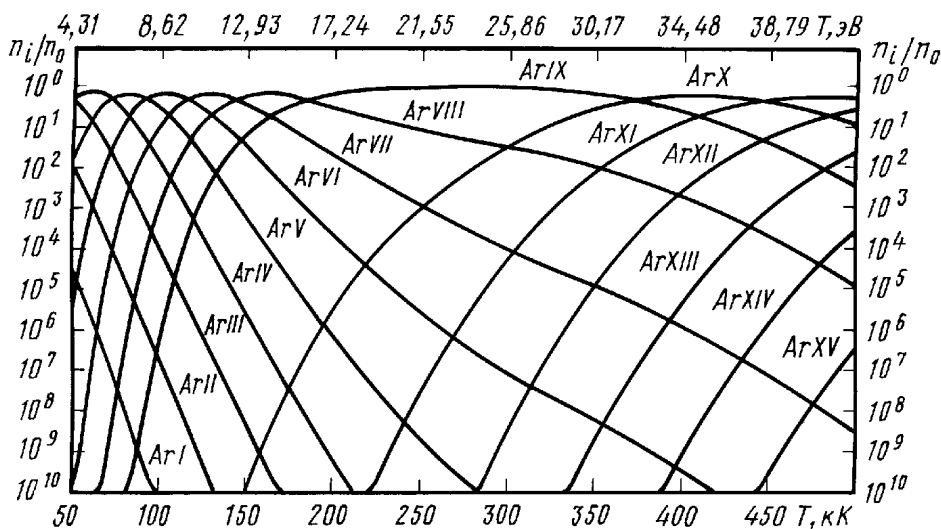


Рис. 3. Ионизационный состав плазмы аргона при плотности $0,1 \text{ кг/м}^3$

шем увеличении плотности при низких температурах; высокая неидеальность плазмы ($\Gamma > 1$); отклонения от состояния ЛТР, приводящие к невозможности использования уравнения Саха (например, в случае “коронарного предела”) [2].

Базы данных по транспортным свойствам атомарной многокомпонентной плазмы сложного химического состава “ТОТ–транспорт”.

Базы данных “ТОТ–транспорт” содержат сведения о транспортных свойствах (электропроводности, полной теплопроводности, электронной, ионной, реактивной теплопроводностях, вязкости) плазмы различных элементов таблицы Менделеева и их смесей как функций от плотности и температуры (в диапазонах плотностей от $0,0001$ до 10 кг/м^3 и температур от 5 до $5 \cdot 10^3 \text{ К}$) (рис. 5). Генерация БД проведена расчетным путем, в доступных областях диаграммы $\rho - T$ проведено сравнение результатов с экспериментальными и теоретическими данными [10]. Базы данных представляют собой набор структурированной информации в форме таблиц, графиков, а также в текстовом (ASCII) формате.

Вычисление коэффициентов переноса базируется на принципе раздельного описания процессов электронного и ионного переносов [4, 18, 19]. Электронные коэффициенты переноса рассчитываются по формулам Фроста [19], ионные коэффициенты переноса вычисляются методами Чепмена–Энскога [18]: вязкость — методом первого порядка, ионная теплопроводность — методом второго порядка. Потенциалы взаимодействия тяжелых заряженных частиц считаются кулоновски-

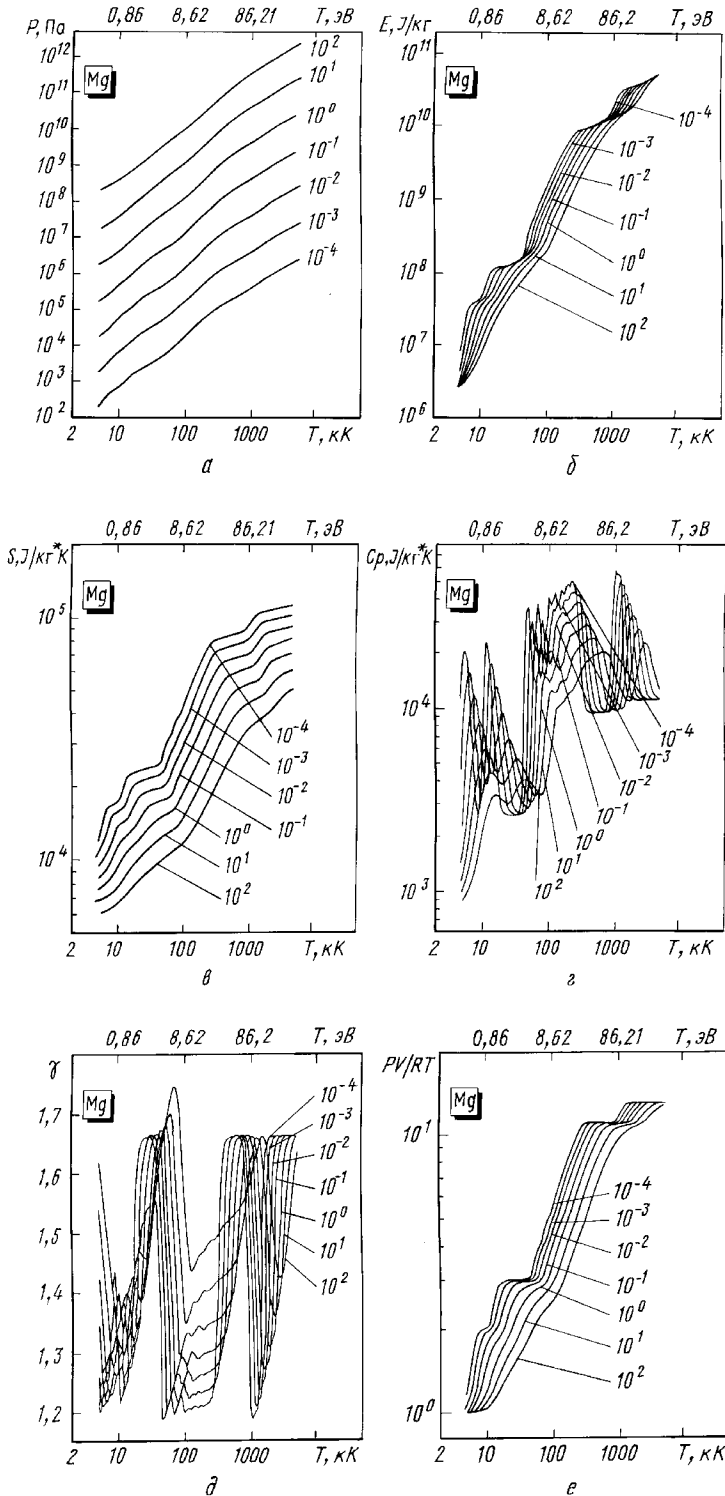


Рис. 4. Термодинамические свойства плазмы магния:

a — давление; *б* — удельная внутренняя энергия; *в* — удельная энтропия; *г* — удельная изобарная теплоемкость; *д* — эффективный показатель адиабаты; *е* — термическое уравнение состояния; цифры в поле графиков означают плотность (кг/м³)

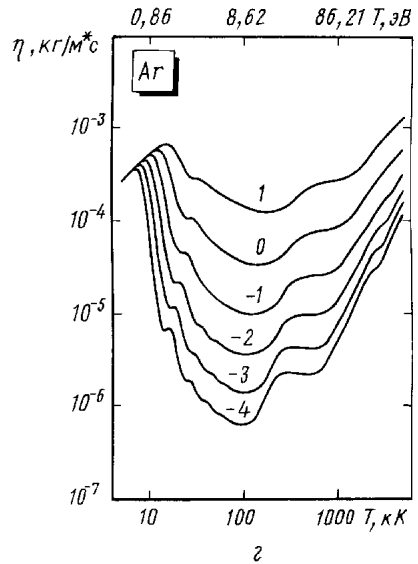
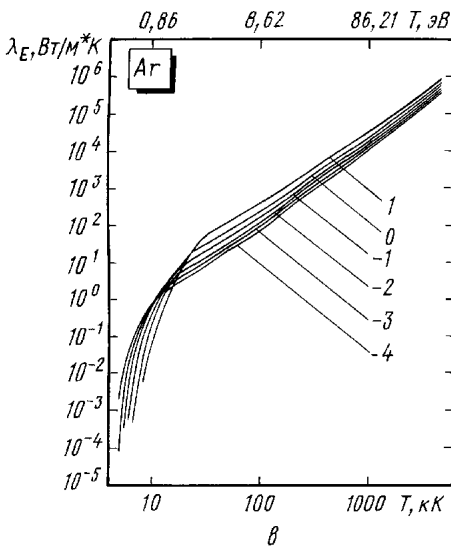
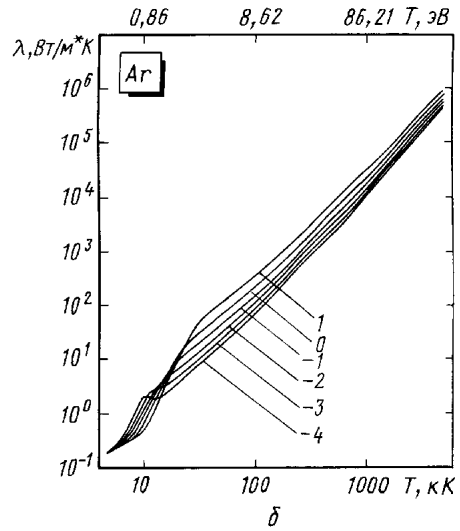
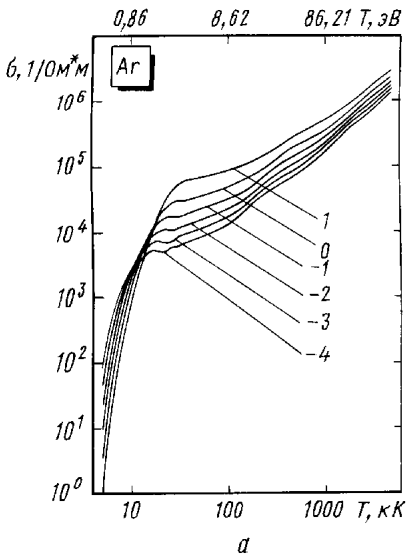


Рис. 5. Транспортные свойства аргона:

a — электропроводность; *б* — теплоемкость; *в* — электронная теплоемкость; *г* — вязкость; цифры в поле графиков означают порядок плотности: например, “2” соответствует 10^{-2} кг/м³

ми, экранированными по Дебаю, что методически соответствует учету плазменной неидеальности с помощью кольцевого приближения [7].

Базы данных по длинам волн, силам осцилляторов и параметрам штарковского уширения для разрешенных дипольных переходов атомов и ионов “ТОТ–линии”.

Базы данных по параметрам разрешенных оптических (дипольных) переходов (длине волны, силе осцилляторов, параметрам штарковского уширения в поглощении) атомов и ионов созданы для большинства элементов таблицы Менделеева. Информация представляется в табличном и электронном видах, содержит следующие данные для каждого разрешенного дипольного перехода: электронную конфигурацию нижнего состояния; электронную конфигурацию верхнего состояния; спиновой, орбитальный, полный моменты и четность нижнего состояния; спиновой, орбитальный, полный моменты и четность верхнего состояния; энергию нижнего и верхнего состояний (см^{-1}); длину волны перехода (Å); силу осциллятора; параметры штарковского уширения. Дополнительно к БД форматируется подпрограмма перевода приводимых в таблицах параметров штарковского уширения в полуширину и сдвиг линии при расчете лоренцовского контура в зависимости от температуры и плотности плазмы (или концентрации электронов и ионов).

Для генерации этих БД используются БД “ТОТ–состояния”. Далее методом Бейтса–Дамгаард [20] проводится расчет для всех возможных переходов между приведенными уровнями (расчет проводится только для разрешенных дипольных переходов), и определяются параметры ударного уширения спектральных линий электронами в приведенном (не зависящем от T и ρ) виде [10].

Базы данных по оптическим свойствам атомарной многокомпонентной плазмы сложного химического состава “ТОТ–оптика”.

Базы данных “ТОТ–оптика” включают в себя: экспериментальные и теоретические данные по оптическим свойствам атомарной многокомпонентной слабонеидеальной плазмы различных элементов таблицы Менделеева и их смесей как функции от энергии квантов, плотности и температуры (в диапазонах плотностей $10^{-4} \dots 10^2 \text{ кг/м}^3$, температур $5 \cdot 10^3 \dots 5 \cdot 10^6 \text{ К}$ и энергий квантов $10^{-1} \dots 10^3 \text{ эВ}$) в виде суммарных спектров поглощения, многогруппового осреднения по Планку и Расселанду, многогруппового осреднения с учетом оптической толщины среды, а также коэффициента поглощения в непрерывном спектре (рис. 6). При генерации расчетных БД используются БД по энергетическим уровням атомов и ионов и по длинам волн, силам осцилляторов и параметрам штарковского уширения для разрешенных дипольных переходов. Расчет проводится при определении парциаль-

ного вклада в суммарный коэффициент поглощения от элементарных радиационных процессов: связанно-связанных, связанно-свободных и свободно-свободных переходов [10, 21]. При этом, расчет свободно-свободных переходов проводится с использованием формул Крамерса с учетом фактора Гаунта [13] (тормозное поглощение). Расчет частичного вклада от сечений связанно-свободных переходов разделяется на индивидуальный учет сечений фотоионизации основных низковозбужденных состояний и внутренних оболочек по оригинальной методике [9]; учет сечений фотоионизации возбужденных состояний проводится по методу квантового дефекта [20]; интегральный учет фотоионизации высоковозбужденных состояний — по формулам Бибермана–Нормана с учетом поправки на сдвиг порогов фотоионизации по Инглису–Теллеру [13]. Дискретный спектр коэффициентов поглощения (линейчатый спектр) рассчитывается с использованием БД “ТОТ–линии”, профиль линий считается лоренцевским с уширением за счет квадратичного штарк-эффекта (ударное уширение электронами).

Основные трудности при решении задач переноса излучения связаны с анализом эмиссионных спектров с многочисленными линиями, когда в узком частотном интервале значения коэффициентов поглощения изменяются на несколько порядков многократно, при этом каждая линия имеет достаточно сложный контур. Дискретный спектр поглощения даже одного элемента содержит порядка $10^4 \dots 10^5$ линий, на описание профиля каждой из которых требуется от 7 до 10^2 точек. Суммарное число точек в рассчитанной спектральной зависимости коэффициента поглощения может превышать 10^8 (для одной пары значений T и $\rho(n_0)$). Выходов из этой ситуации — два: первый — создание “замкнутой” программной системы, т.е. системы, которая бы использовала не результаты, а сами методы комплекса АСНИР ТОТ (или весь комплекс) в цикле расчетов, что позволит не создавать банки данных по коэффициентам поглощения и повысит точность расчетов; второй — использование приближенных методик аппроксимации спектра излучения.

Методика локального усреднения предполагает предварительную обработку коэффициента поглощения для замены реального спектра ступенчатой моделью, более или менее адекватной первоначальному спектру. Усредненные коэффициенты поглощения считаются при этом не зависящими от оптической плотности и определяются локальными параметрами состояния (плотностью, температурой, химическим составом плазмы). Наиболее часто используется многогрупповое приближение, в котором спектры разбиваются на ряд частотных интервалов и приближаются кусочно-постоянными функциями [1, 3]. Количество участков спектра, в которых усредняют коэффициент поглощения,

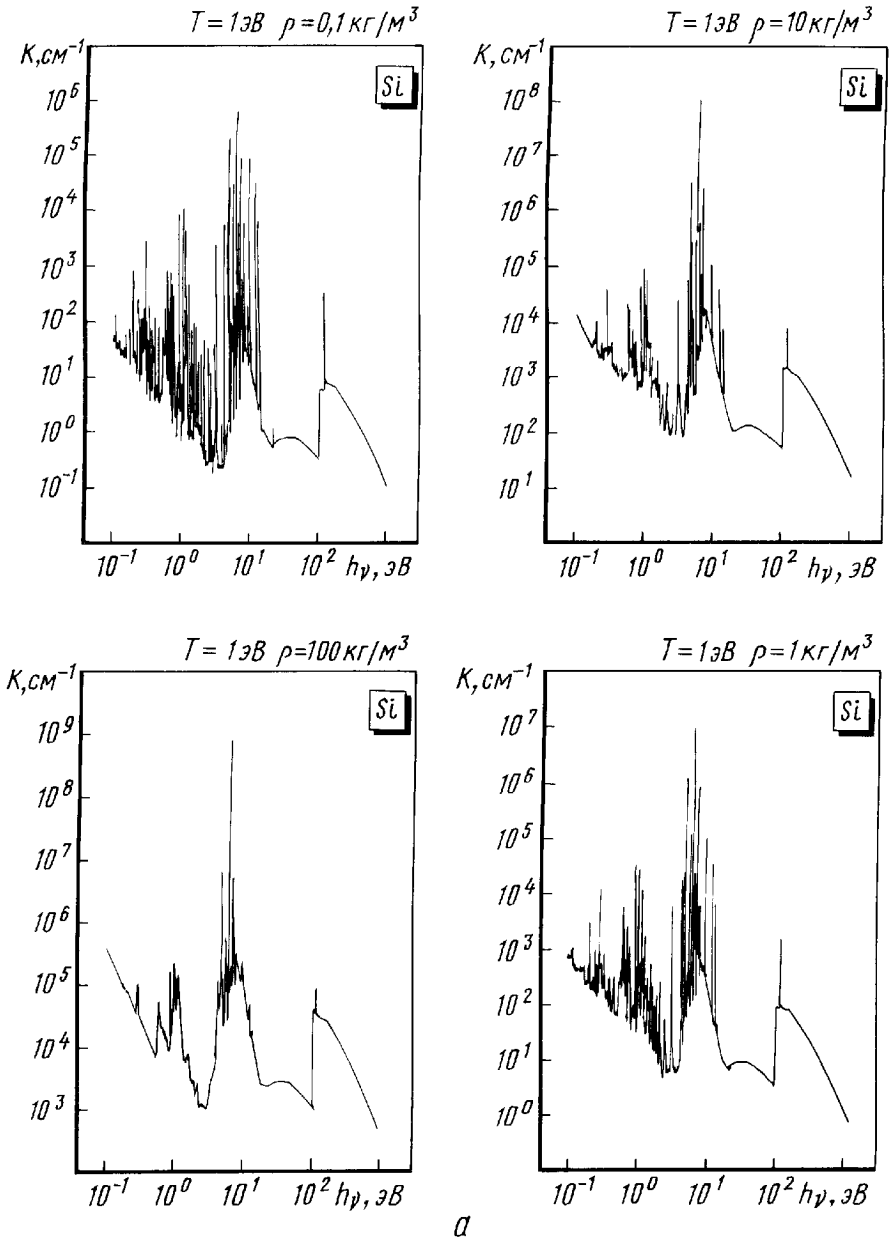
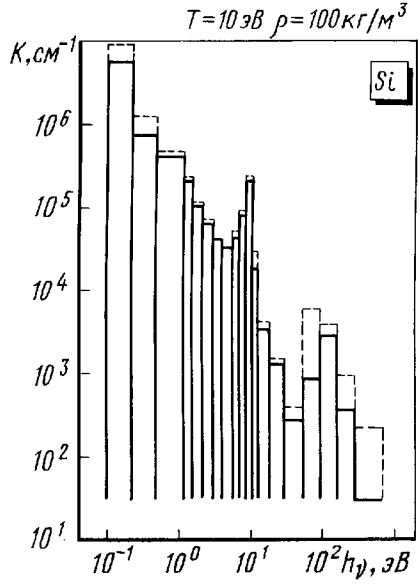
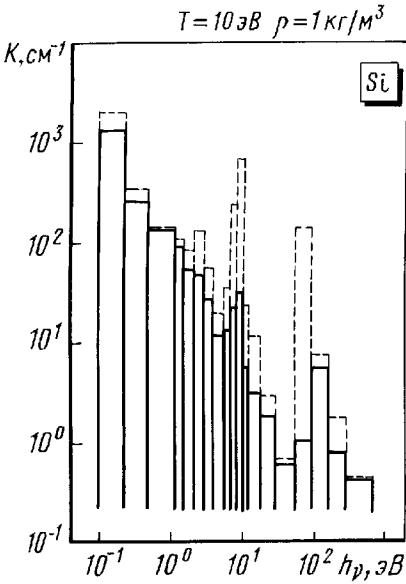
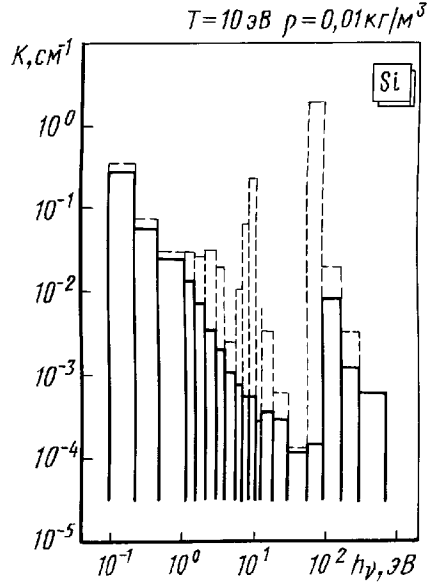
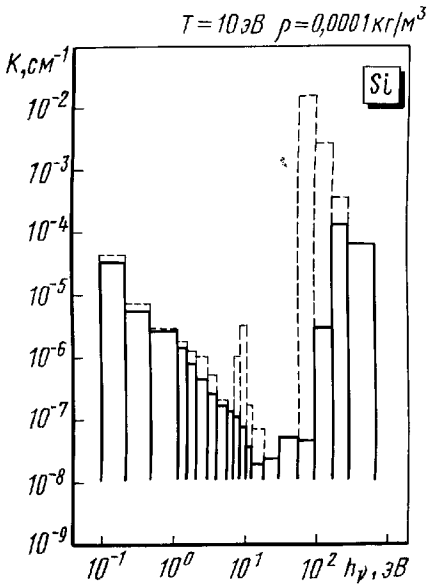


Рис. 6 (Начало). Оптические свойства кремния:

a — суммарный спектр коэффициента поглощения плазмы кремния для разных значений T и ρ ; *b* — многогрупповое усреднение спектра поглощения кремния, по Росселанду — сплошная, по Планку — штриховая линия



δ

Рис. 6 (Окончание)

определяется решаемой задачей. В задачах теплообмена излучением оказывается достаточно спектральную область разбить на несколько участков ($\sim 2 \dots 10$). В задачах, связанных со спектральной диагностикой газовых потоков, приходится вводить сотни участков усреднения. Примером многогрупповых моделей коэффициента поглощения воздуха служат табличные данные [1, 3–5]. Такое приближение достаточно хорошо описывает непрерывный спектр, особенно, если границы групп примерно соответствуют местам наиболее сильных скачков коэффициентов поглощения. Однако дискретный спектр таким образом передать не удастся: при характерных для линий перепадах коэффициентах поглощения роль отдельных частотных интервалов в радиационном переносе энергии сильно зависит от параметров поля излучения, характерных размеров плазмы и др. Например, в случае малого по размерам, оптически прозрачного плазменного образования основную роль в радиационном охлаждении играют центры линий; увеличение размеров плазмы при сохранении ее локальных параметров до достижения большой оптической плотности в центрах линий — приводит к тому, что соответствующие спектральные области практически “выключаются” из радиационного теплообмена в силу “запираания” излучения в линиях. При этом на первый план выходит перенос излучения в непрерывном спектре, к которому добавляется вклад от крыльев уширенных линий. При увеличении числа групп до $10^3 \dots 10^4$ точность описания спектра становится достаточной для относительно верного отражения радиационного переноса. В этом случае уже можно использовать прямое интегрирование по частоте.

Обобщенные методики и тестовые результаты расчетов термодинамических, оптических и транспортных свойств плазмы активных сред и конструкционных материалов энергетических установок. Разработанный комплекс методов расчета и программных компонент АСНИР ТОТ позволяет определять: парциальный состав и термодинамические функции; переносные свойства; непрерывные и дискретные спектры; групповые и интегральные радиационные характеристики атомарной плазмы плазмообразующих элементов широкой номенклатуры и их смесей в широких диапазонах изменения температуры ($1 \dots 100$ эВ и выше), плотности ($10^{-4} \dots 10$ кг/м³), энергии квантов ($0,1 \dots 1000$ эВ) и характерного размера плазменного объема, имея в качестве входной информации только температуру, плотность, элементный состав плазмы и БД по квантово-механическим состояниям атомов и ионов, входящих в смесь. Логика расчетных процедур следующая: после инициализации БД “ТОТ–состояния” определяется парциальный состав, затем в зависимости от выбранного варианта —

термодинамические функции, переносные свойства, непрерывный или суммарный спектры коэффициента поглощения и групповые средние и интегральные радиационные характеристики.

Некоторые результаты массовых расчетов, проведенных для плазмы магния, аргона и кремния, представлены на рис. 3–6. Из рисунков видны ионизационный состав, термодинамические характеристики и транспортные свойства в диапазонах температур $5 \cdot 10^3 \dots 5 \cdot 10^6$ К с шагом в логарифмических координатах $\lg \Delta T = 0,3$, плотности — от 10^{-4} до 10^2 кг/м³ с шагом $\lg \Delta \rho = 1$, а также результаты расчета суммарного спектра поглощения, где профиль линии рассчитывался по 20 точкам, исходя из следующих условий: 1) $\kappa'_\nu(\nu_0) > 0,2\kappa'_\nu(\nu_0)$ — коэффициент поглощения в центре линии больше 20 % коэффициента поглощения в непрерывном спектре; 2) полная ширина линии определяется условием $\kappa'_\nu(\nu_1) < 0,1\kappa'_{\nu n}(\nu_i)$ и $\kappa'_\nu(\nu_2) < 0,1\kappa'_{\nu n}(\nu_2)$; 3) интервал $[\nu_1 \nu_2]$ разбивается на 20 точек с шагом в логарифмических координатах с основанием логарифма $(\nu_2 - \nu_1)/\nu_1$, что позволяет более подробно описывать центральную часть линии. После этого, если выполнено первое условие, производится аддитивное наложение линии на итоговый спектр и для получения необходимой дисперсии для каждого иона проводится частотная выборка (прореживание) суммарного спектра.

Следует отметить, что параметры спектральных линий, данные по парциальному составу, термодинамическим функциям, транспортным свойствам и БД по квантово-механическим состояниям атомов и ионов представляют самостоятельный практический интерес. Сравнение доступных экспериментальных и расчетных данных, проведенное в диапазоне параметров — плотностей ($10^{-4} \dots 10$ кг/м³) и температур (0,5 ... 30 эВ) [10] для ряда плазмообразующих элементов (алюминия, аргона, водорода, углерода и др.), показывает их удовлетворительное соответствие, что позволяет осуществить программный комплекс АСНИР ТОТ как инструмент надежного экспресс-анализа термодинамических, оптических и транспортных свойств плазмы активных сред энергетических и технологических установок широкого ряда.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. О п т и ч е с к и е свойства горячего воздуха / И.В. Авилов, Л.М. Биберман, В.С. Воробьев и др. – М.: Наука, 1970. – 320 с.
2. С о с т а в и термодинамические функции плазмы: Справочник / Б.В. Замышляев, Е.Л. Ступицкий, А.Г. Грузь, В.Н. Жуков. – М.: Энергоатомиздат, 1984. – 144 с.
3. Р а д и а ц и о н н ы е свойства газов при высоких температурах / В.А. Каменщиков, Ю.А. Пластинин, В.М. Николаев, Л.А. Новицкий. – М.: Машиностроение, 1971. – 440 с.

4. С о к о л о в а И. А. Компьютеризованная библиотека транспортных свойств атмосферных газов и плазмы // Математическое моделирование. – 1998. – Т. 10. – № 2. – С. 25–40.
5. Т е р м о д и н а м и ч е с к и е и оптические свойства ионизованных газов при температурах до 100 эВ / Ю.П. Бойко, Ю.С. Протасов, С.Н. Чувашев и др.; Под ред. Ю.С. Протасова. – М.: Энергоатомиздат, 1988. – 192 с.
6. Т е р м о д и н а м и ч е с к и е и оптические свойства плазмы металлов и диэлектриков / Ю.П. Бойко, Ю.С. Протасов, С.Н. Чувашев и др.; Под ред. Ю.С. Протасова. – М.: Металлургия, 1988. – 356 с.
7. Т е п л о ф и з и ч е с к и е свойства рабочих сред газофазного ядерного реактора / В.К. Грязнов, И.Л. Иосилевский, Ю.Г. Красников и др.; Под ред. В.М. Иевлева. – М.: Атомиздат, 1982. – 304 с.
8. T h e r m o d y n a m i c s and optical properties of plasma metals and dielectrics / Ed. by Yu.S. Protasov. – NY: Hemisphere Publ. Corp., 1996. – 407 p.
9. O p t i c a l properties of ionized gases at temperature up to 100 eV / Ed. by Yu.S. Protasov. – NY: Hemisphere Publ. Corp., 1997. – 321 p.
10. Т е р м о д и н а м и ч е с к и е, оптические и транспортные свойства рабочих веществ плазменных и фотонных энергетических установок: В 2 т. / Под ред. Ю.С. Протасова. – М.: Изд-во МГТУ им. Н.Э. Баумана, 1999–2000. – Т. 1. – 1999. – 640 с.; Т. 2. – 2000. – 720 с.
11. Б у ш м а н А. В., Ф о р т о в В. Е. Модели уравнения состояния вещества // Успехи физических наук. – 1983. – Т. 40. – № 2. – С. 177–192.
12. К а л и т к и н Н. Н. Модели вещества в экстремальном состоянии // Математическое моделирование: физико-химические свойства вещества. – М.: Наука, 1989. – С. 114–161.
13. Б и б е р м а н Л. М., Н о р м а н Г. Э. Непрерывные спектры атомарных газов и плазмы // Успехи физических наук. – 1967. – Т. 91. – № 2. – С. 193–246.
14. В о л о к и т и н В. С., К а л и т к и н Н. Н. Модели статистических сумм атомов и молекул // Математическое моделирование. – 1991. – Т. 3. – Вып. 5. – С. 49–60.
15. С т р и г а н о в А. Р. Успехи в исследовании спектров атомов и ионов и степень их изученности в настоящее время // Успехи физических наук. – 1983. – Т. 139. – Вып. 4. – С. 719–731.
16. M o o r e C. E. Selected Tables of Atomic Spectra, Atomic Energy Levels and Multiplet Tables. Washington: NBS. – 1965–1980. – 10 V.
17. M o o r e C. E. Atomic Energy Levels. – Washington: National Bureau of Standards. Circular 467. – Vol. 1. – 1949. – 309 p.; Vol. 2. – 1952. – 227 p.; Vol. 3. – 1958. – 245 p.
18. А л е к с е е в Б. В., Г р у ш и н И. Т. Процессы переноса в реагирующих газах и плазме. – М.: Энергоатомиздат, 1994. – 432 с.
19. Ч а с т и ч н о ионизованные газы / М. Митчнер, Ч. Кругер; Под ред. А.А. Иванова. – М.: Мир, 1976. – 406 с.
20. С о б е л ь м а н И. И. Введение в теорию атомных спектров. – М.: Наука, 1977. – 320 с.
21. Э н ц и к л о п е д и я низкотемпературной плазмы. Вводный том. Кн.1. / Под ред. В.Е. Фортова. – М.: Наука, 2001. – 586 с.

Статья поступила в редакцию 25.03.2002