

# АППРОКСИМАЦИЯ РЕАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВОДОРОДА ПРИ БОЛЬШИХ СТЕПЕНЯХ СЖАТИЯ, ПОЛУЧЕННОГО В ФИЗИЧЕСКИХ ЭКСПЕРИМЕНТАХ

## APPROXIMATION OF THE REAL STATE EQUATION OF HYDROGEN AT HIGH COMPRESSION LEVELS OBTAINED IN PHYSICAL EXPERIMENTS

S. Yagupov

### Annotation

Discusses the mathematical simulation of isentropic compression of hydrogen with real state equation [9] up to a large values of densities. At these density values in the behavior of isentropy there is a certain anomaly, which is associated [9] with the transition of molecular hydrogen into atomic phase. At this period change the density of hydrogen does not satisfy the properties of the normal gas. The real equation of state of hydrogen [9] for large values of the pressure approximated by different functions, including different parts of the density changes. Set the error of these approximations. The obtained approximation can be used for subsequent mathematical modeling at high degrees of compression of hydrogen.

**Keywords:** The real state equation of hydrogen, compression up to large values of density, approximation of analytic functions.

Ягулов Станислав Александрович  
К.ф-м.н., Уральский  
государственный университет  
путей сообщения

### Аннотация

Рассматриваются вопросы математического моделирования изэнтропического сжатия водорода с реальным уравнением состояния [9] до больших степеней плотности. При этих значениях плотности в поведении изэнтропы наблюдается определенная аномалия, которую связывают [9] с переходом водорода из молекулярной фазы в атомарную. На данном промежутке изменения плотности водород не удовлетворяет свойствам нормального газа. Реальные уравнения состояния водорода [9] при больших значениях давления аппроксимированы разными аналитическими зависимостями, в том числе на разных участках изменения плотности. Установлены погрешности этих аппроксимаций. Полученные аппроксимации можно использовать для последующего математического моделирования при больших степенях сжатия водорода.

### Ключевые слова:

Реальное уравнение состояния водорода, сжатие до больших значений плотности, аппроксимация аналитическими функциями.

Решение многих важных прикладных проблем, одной из которых является осуществление управляемого термоядерного синтеза, в том числе с использованием лазерного излучения [4], невозможно без математического моделирования. Главная трудность в разрешении упомянутой физической проблемы – сжатие нужного вещества до очень большой плотности. При этом более выгодно с точки зрения внешних затрат энергии сжатие, при котором в сжимаемой среде не возникают ударные волны. В качестве математической модели, достаточно адекватно описывающей подобные процессы, часто берут модель идеального газа.

Ниже строятся такие решения системы уравнения газовой динамики для политропного газа которые описывают процессы безударного сильного сжатия газа.

В системе (1)  $\sigma = \rho^{(\gamma-1)/2}$ ;

$\rho$  – плотность;  $\lambda$  – константа в уравнении состояния

$$p = A^2(S)\rho^\gamma / \gamma, \gamma > 1;$$

$$\begin{cases} \sigma_t + \vec{V} \cdot \nabla \sigma + \frac{(\gamma-1)}{2} \sigma \cdot \text{div} \vec{V} = 0, \\ \vec{V}_t + (\vec{V} \cdot \nabla) \vec{V} + \frac{2}{(\gamma-1)} \sigma \cdot s^2 \nabla \sigma + \frac{2}{\gamma} \sigma^2 s \nabla s = \vec{0}, \\ s_t + \vec{V} \nabla s = 0, \end{cases} \quad (1)$$

$p$  – давление;  $S$  – энтропия;  $s = A(S)$ ;

$\vec{V} = (u, v, w)$  – скорость газа;

$\nabla = (\partial / \partial x_1, \partial / \partial x_2, \partial / \partial x_3)$  – оператор градиента;

точкой помечено скалярное произведение;  $t, x_1, x_2, x_3$  – независимые переменные, обозначающие соответственно время и декартовы координаты точки из  $R_3$ ;

$\vec{U} = (\sigma, u, v, w, s)$  – искомые функции.

При этом  $c$  – скорость звука газа задается соотношением  $c = s\sigma^1$ .

Сильное сжатие газа представляет интерес для решения различных физических задач, в том числе для реализации управляемого термоядерного синтеза. При этом режимы безударного сжатия газа оказываются энергетически более выгодными, чем сжатие газа с использованием ударных волн [4]. Кроме этого, именно режимы безударного сильного сжатия позволяют получить большие значения плотности газа.

Для более адекватного описания процессов, имеющих при сильном сжатии газа, необходимо исследовать соответствующие решения нелинейной системы с частными производными – системы уравнений газовой динамики, замкнутой с помощью конкретного уравнения состояния. При этом для реальных физических экспериментов наибольший интерес представляют такие решения систем уравнений газовой динамики, в которых первоначальное состояние газа является однородным покоем. А кроме этого, краевые условия, соответствующие рассматриваемому решению, должны обеспечить замкнутость объема газа, подвергающегося сжатию.

Математическое моделирование безударного сильного сжатия газа ведется в различных направлениях.

Первое направление математического моделирования безударного сильного сжатия газа (первоначально однородного и покоящегося газа) состоит в использовании точных решений систем уравнений газовой динамики для политропного газа.

Е.И. Забабахиным, Е.И. Забабахиным [4] указано, что впервые простая центрированная волна Римана применена Гюгионо в 1889 г. [14] и Рэлеем в 1910 г. [15] к описанию безударного сильного сжатия плоского слоя газа. Подробное описание безударного сжатия до бесконечной плоскости плоского слоя первоначально однородного и покоящегося газа имеется в книге К.П. Станюковича [13]. А.Ф. Сидоровым [16] имеющийся при построении не автомодельной простой волны Римана произвел в одну функцию одной переменной, использован для описания сжатия плоского слоя, в котором бесконечное значение плотности достигается только в одной точке.

В книге Р. Мизеса [10] описан безударный переход плоского слоя газа из одного однородного покоящегося состояния в другое однородное покоящееся состояние, но с большим значением плотности под действием двух непроницаемых поршней. Описание безударного сильного сжатия первоначально однородного и покоящегося в цилиндре или шаре идеального политропного газа, осуществляется с помощью автомодельных решений Л.И. Седова [11]. Интерпретации этих решений для задач о безударном сильном сжатии газа посвящены работы Я.М. Каждана [7], И.Е. Забабахина, В.А. Симоненко [5], А.Н. Крайко, Н.И. Тилляевой [8].

Другое направление математического моделирования безударного сильного сжатия газа связано с приближенными: аналитическими, численными или комбинированными численно-аналитическими методами. Например, Г.В. Долголевой, А.В. Забродиным [6] рассмотрены решения уравнений газодинамики, реализующие неограниченное по плотности безударное сжатие в плоском, цилиндрическом и сферическом случаях и показано, что в рамках оболочечной системы можно подобрать такой закон энергозатрат, который позволяет воспроизвести зависимости скорости и давления на внешней границе сжимаемого слоя, необходимые для осуществления безударного сжатия в смеси дейтерий-тритий.

В монографии С.П. Баутина [1] предложен единый подход к математическому моделированию безударного сильного сжатия газа. Данный подход состоит в следующем. Сначала для системы уравнений газовой динамики ставятся начально-краевые задачи, описывающие процесс безударного сильного сжатия произвольного, локально аналитического, фонового течения на произвольной, локально аналитической поверхности. Для поставленных начально-краевых задач доказываются теоремы существования и единственности аналитических и кусочно-аналитических решений. При этом одним из элементов составного решения обязательно является обобщение простой центрированной волны Римана. Если это обобщение центрированной волны стыкуется через слабый разрыв только с фоновым течением, то таким образом описывается сжатие газа до бесконечной плотности. Сжатие газа до любой наперед заданной конечной плотности описывается при состыковке обобщенной центрированной волны: с одной стороны, через слабый разрыв с фоновым течением, а с другой – через второй слабый разрыв с течением, имеющим наперед заданное нужное распределение плотности. Решения рассматриваемых задач представляемых в виде бесконечных рядов с коэффициентами, рекуррентно определяемыми в явном виде или через квадратуры. Исследуются свойства решений, в том числе, устанавливаются асимптотические законы поведения газодинамических параметров при неограниченном росте плотности. Этот подход получил дальнейшее развитие как в работах С.П. Баутина [2], так и в работах его учеников.

Одним из наиболее актуальных на сегодня направлений математического моделирования безударного сильного сжатия газа (см. [12, с. 467], [1, с. 139]) является учет реальных уравнений состояния, полученных в соответствующих, как правило, очень сложных физических экспериментах, в которых исследуются термодинамические свойства заданных реальных сред.

Рассматривается система уравнений газовой динамики с произвольным уравнением состояния. Уравнение состояния может быть представлено в разных видах. На-

пример, если уравнение состояния представлено в виде то система уравнений газовой динамики для одномерных течений имеет вид

$$\begin{cases} \rho_t + u\rho_r + \rho(u_r + v\frac{u}{r}) = 0, \\ u_t + uu_r + \frac{1}{\rho} p_r = 0, \\ e_t + ue_r + \frac{p}{\rho}(u_r + v\frac{u}{r}) = 0. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь:

$$r = \sqrt{\sum_{i=1}^{\vartheta+1} x_i^2} \geq 0, \vartheta = 0, 1, 2, \rho \quad \rho - \text{плотность,}$$

$$u - \text{скорость,}$$

$$p - \text{давление, } e - \text{внутренняя энергия, } t - \text{время.}$$

Рассмотрим уравнение состояние водорода при больших значениях давления при переходе из молекулярной фазы в атомарную.

В работе [9] в виде графика (см. рис. 1) приведена зависимость давления  $p$  и от плотности  $\rho$ , описывающая изэнтропическое сжатие водорода до очень больших значений давления и плотности. Единицы измерения на (рис. 1): вдоль оси абсцисс –  $\text{г/см}^3$ , вдоль оси ординат – ГПа. В диапазоне изменения плотности  $0,9 - \text{г/см}^3$  скорость нарастания давления от 260 ГПа до 380 ГПа существенно меняется. Такая аномалия в поведении давления связывается [9] с переходом водорода при этих условиях из молекулярного состояния в атомарное.

Для математического исследования зависимости

давления от плотности, полученной в результате физических экспериментов, представленной на графике (рис. 1) удобно представлять данную зависимость аналитическими функциями. Такие аналитические функции будем находить в виде рациональных дробей и полиномов разных старших степеней. Также исследуем погрешность, с которой зависимость давления от плотности (рис. 1) аппроксимируется найденными аналитическими функциями.

Сначала рассмотрим аппроксимацию рациональной дробью. Ранее [3] были произведены расчеты для нахождения коэффициентов такой рациональной дроби. Функция имеет вид:

$$p(\rho) = \frac{\sum_{k=0}^5 a_k \rho^k}{1 + \sum_{k=1}^5 b_k \rho^k},$$

при таких значениях коэффициентов:

$$a_0 = 0,17267, a_1 = -10,45064,$$

$$a_2 = 222,94558, a_3 = -491,67923,$$

$$a_4 = 374,52811, a_5 = -92,79727,$$

$$b_1 = -2,88596, b_2 = 3,16174,$$

$$b_3 = -1,66439, b_4 = -0,45715,$$

$$b_5 = 0,05961.$$

В данной работе проведены расчеты для нахождения коэффициентов полиномов, которые аппроксимируют зависимость давления от плотности (рис. 1). Коэффициенты были найдены для полиномов разных старших степеней, как на всем интервале изменений значения плот-

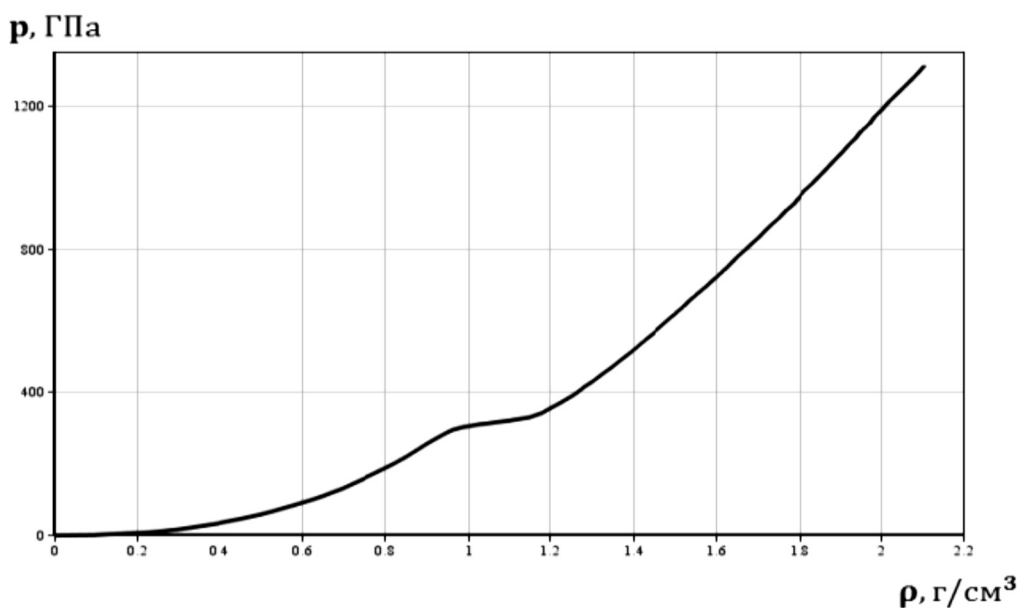


Рис. 1  
График изэнтропы водорода (исходные данные)

ности, та и на интервале, на котором происходит переход водорода из молекулярного состояния в атомарное. Проведен расчет оценки относительной погрешности таких найденных полиномов.

Рассмотрим аппроксимацию зависимости значений давления от плотности, представленной на (рис. 1) при помощи полиномов со степенями 15 и 5, оценим относительную погрешность аппроксимации. Функция

$$p(\rho) = \sum_{k=0}^{15} a_k \rho^k,$$

где коэффициенты принимают следующие значения

$$\begin{aligned} a_0 &= -0,0622107, a_1 = -518,496256, a_2 = \\ &= 13023,477609, a_3 = -123965,859, \\ a_4 &= 618449,144473, a_5 = -1786826,42437, a_6 = \\ &= 3150504,10151, a_7 = -3410169,47311, \\ a_8 &= 2145703,55086, a_9 = -626796,911108, a_{10} = \\ &= -257,8081593, a_{11} = -31814,512088, \\ a_{12} &= 96649,564, a_{13} = -56383,5349594, a_{14} = \\ &= 14040,262236, a_{15} = -1339,226833, \end{aligned}$$

аппроксимирует зависимость давления от плотности (рис. 1) с относительной погрешностью не более 4% (рис. 2). На рис. 2 линией – исходный график, точками – аппроксимирующая зависимость.

Далее рассмотрим полином степени 5 для аппроксимации зависимости давления от плотности (рис. 1).

Функция 
$$p(\rho) = \sum_{k=0}^5 a_k \rho^k,$$

где коэффициенты принимают следующие значения

$$\begin{aligned} a_0 &= 26,125528, a_1 = -495,835687, \\ a_2 &= 2051,24869, a_3 = -2323,05165 \\ a_4 &= 1248,440623, a_5 = -232,454801, \end{aligned}$$

которая является полиномом пятой степени аппроксимирует зависимость давления от плотности (рис. 1) с относительной погрешностью 13% (рис. 3).

На рис. 3 линией – исходный график, точками – аппроксимирующая зависимость.

Рассмотрим аппроксимацию зависимости значений давления от плотности, представленной на (рис. 1) на интервале, где происходит переход водорода из молекулярного состояния в атомарное с помощью полиномов со степенями 15 и 5, оценим относительную погрешность аппроксимации.

Интервал, где происходит переход водорода из молекулярного состояния в атомарное принимает значения от 0,5 до 1,5 г/см<sup>3</sup>,

Функция

$$p(\rho) = \sum_{k=0}^{15} a_k \rho^k,$$

где коэффициенты принимают

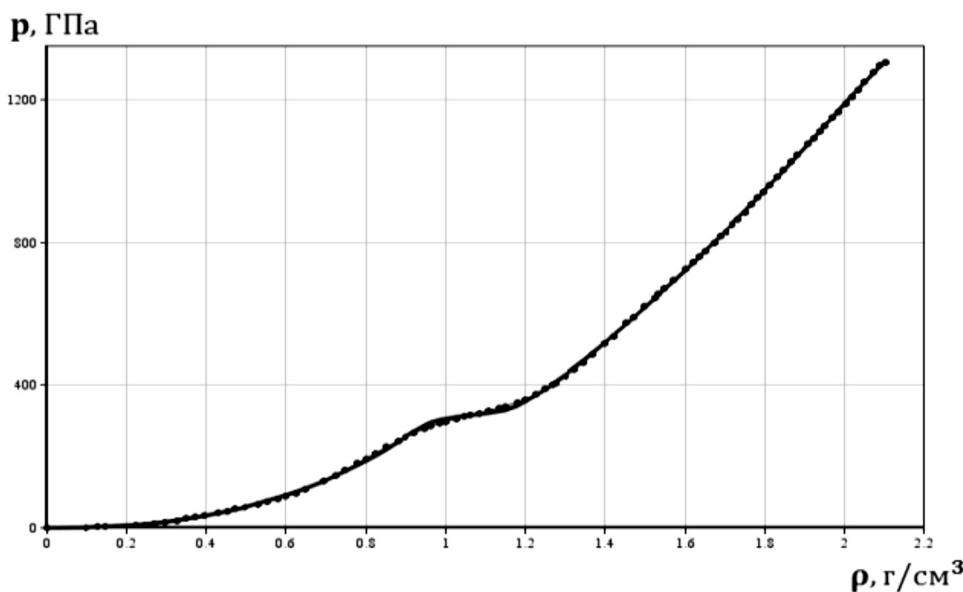


Рис. 2  
Сравнение исходных данных с аппроксимирующей функцией, полиномом степени 15

следующие значения

$$\begin{aligned}
 a_0 &= 17253,1061438, a_1 = -120684,150901, \\
 a_2 &= 295906,850174, a_3 = -222406,802192, \\
 a_4 &= -205727,162039, a_5 = 330663,329157, \\
 a_6 &= 54501,9343272, a_7 = -140133,663198, \\
 a_8 &= -118981,632392, a_9 = 76691,2753, \\
 a_{10} &= 66660,79808, a_{11} = -44,980268, \\
 a_{12} &= -37334,0642304, a_{13} = -14615,0642304, \\
 a_{14} &= 24606,6137, a_{15} = -6151,47789
 \end{aligned}$$

аппроксимирует зависимость давления от плотности (рис. 1) на интервале изменения плотности от 0,5 до 1,5 г/см<sup>3</sup>, с относительной погрешностью не более 1,5% (рис. 4).

На рис. 4 исходный график – линией, точками – аппроксимирующая зависимость.

Далее рассмотрим полином старшей степени 5 для аппроксимации зависимости давления от плотности (рис. 1).

Функция

$$p(\rho) = \sum_{k=0}^5 a_k \rho^k,$$

коэффициенты принимают следующие значения

$$\begin{aligned}
 a_0 &= 4317,7827, a_1 = -24223,9504, \\
 a_2 &= 51709,20673, a_3 = -51708,17787, \\
 a_4 &= 24714,87065, a_5 = -4517,82208,
 \end{aligned}$$

аппроксимирует зависимость давления от плотности (рис. 1) на интервале изменения плотности от 0,5 до 1,5 г/см<sup>3</sup>, с относительной погрешностью 8% (рис. 5).

На рис.5 линией – исходный график, точками – аппроксимирующая зависимость.

Таким образом, данные физических экспериментов по определению реальных уравнений состояния водорода при больших значениях давления аппроксимированы разными аналитическими зависимостями, в том числе на разных участках изменения плотности.

Установлены погрешности этих аппроксимаций.

Полученные аппроксимации можно использовать для последующего математического моделирования при больших степенях сжатия водорода.

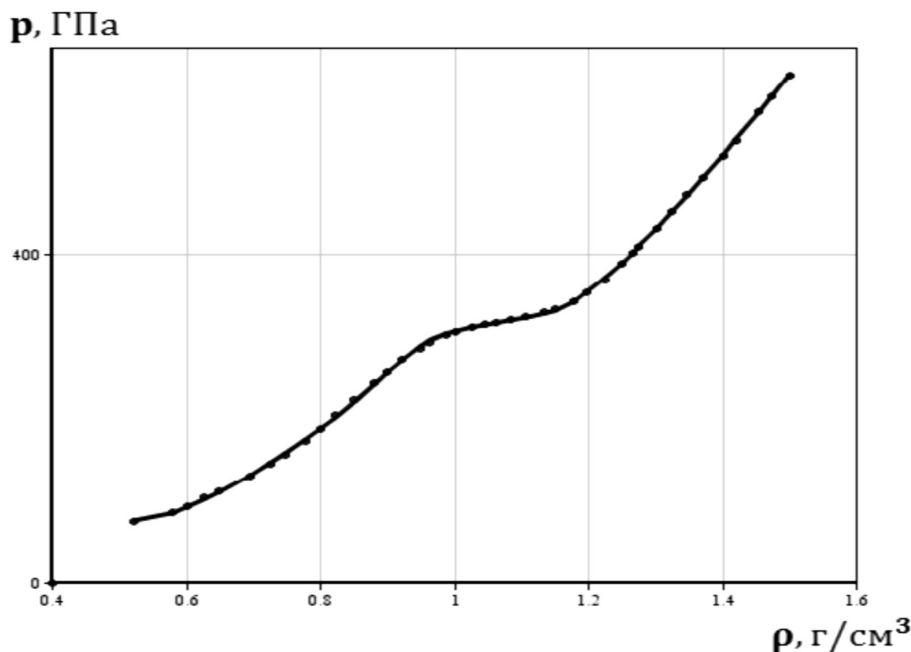


Рис. 4

Сравнение исходных данных с аппроксимирующей функцией. полиномом степени 15 на среднем участке

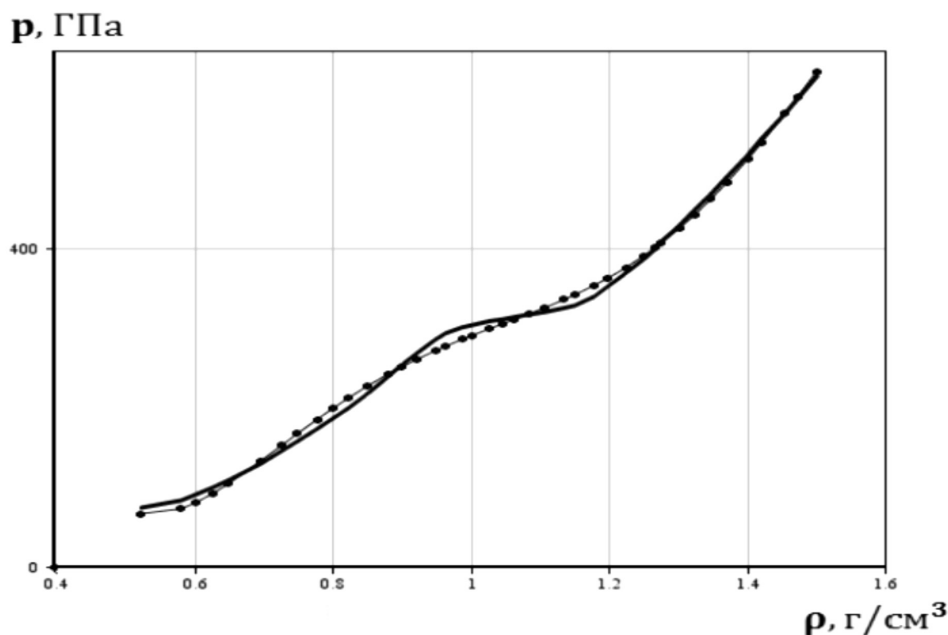


Рис. 5

Сравнение исходных данных с аппроксимирующей функцией, полиномом 5 степени на среднем участке

## ЛИТЕРАТУРА

1. Баутин С.П. Математическая теория безударного сильного сжатия идеального газа. – Новосибирск: Наука, 1997. – 160 с.
2. Баутин С.П. Безударное сверхсжатие идеального газа. // Вычислительные технологии. 1998. – Т. 3, № 6. – С. 3–8.
3. Баутин С.П., Ягунов С.А. Математическое исследование безударного сжатия водорода с реальным уравнением состояния // Вычислительные технологии. – 2001. – Т. 6 – С. 103–107.
4. Забабахин Е.И. Забабахин И.Е. Явления неограниченной кумуляции. М.: Наука, 1988. – 172 с.
5. Забабахин И.Е., Симоненко В.А. Сферическая центрированная волна сжатия // Прикладная математика и механика. 1978. Т. 42, вып. 3. – С. 573–576.
6. Долголева Г.В., Забродин А.В. Разработка темоядерных мишеней на основе реализации концепции безударного сжатия // Аэромеханика и газовая динамика. 2002, №2. – С. 48–54.
7. Каждан Я.М. К вопросу об адиабатическом сжатии газа под действием сферического поршня // Журнал прикладной механики и технической физики. – 1977. – № 1. – С. 23–30.
8. Крайко А.Н., Тилляева Н.И. Автомодельное сжатие идеального газа плоским, цилиндрическим или сферическим поршнем // Теплофизика высоких температур. – 1998. Т. 36, № 1. С. 120–128.
9. Копышев В.П., Урлин В.Д. Изэнтропическая сжимаемость водорода и уравнения состояния водорода до давления 1ТПа // Ударные волны и экстремальные состояния вещества. Под ред. В.Е. Фортова и др. М.: Наука – 2000. – С. 297–314.
10. Мизес Р. Математическая теория течений сжимаемой жидкости. М.: Изд-во иностр. лит. – 1961. – 188 с.
11. Седов Л.И. Методы подобия и размерности в механике. – М.: Наука, 1981. – 448 с.
12. Сидоров А.Ф. Избранные труды: математика. Механика. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2001. – 576 с.
13. Станюкевич К.П. Неустановившиеся движения сплошной среды. М.: Гос. изд-во техн.-теор. лит-ры. – 1955. – 804 с.
14. Hugoniot P.H. Sur la propagation du mouvement dans les corps et spécialement dans les gas parfaits, II // Journal de l'Ecole Polytechnique. – 1889. – № 5. – P. 1–125.
15. Lord Rayleigh (Strutt J.W.) Aerial plane of finite amplitude // Proceedings of the Royal Society of London. 1910. – Vol. 84. – P. 247–284.