

## АЛГОРИТМЫ РАСЧЕТА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ В ДВУХФАЗНОЙ ОБЛАСТИ ЖИДКОСТЬ-ПАР

*Данилов Артем Сергеевич (ASDanilov@vniief.ru), Куделькин Вадим Григорьевич,  
Гордеев Дмитрий Геннадьевич, Жильникова Наталия Николаевна*

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

В работе приведено описание алгоритмов расчета термодинамических функций на границе двухфазной области жидкость-пар. Результаты расчетов термодинамических функций на границе аппроксимируются с использованием сплайнов с автоматической расстановкой узлов. В дальнейшем построенные аппроксимации используются для проверки соответствия входных параметров состояниям внутри двухфазной области и как начальные приближения при расчете термодинамических функций внутри двухфазной области.

Разработанные алгоритмы реализованы в виде отдельного программного модуля, позволяющего совместно с полуэмпирическими уравнениями состояния рассчитывать термодинамические функции на границе и внутри фазового перехода для входных переменных плотность-температура, плотность-удельная внутренняя энергия и плотность-давление.

**Ключевые слова:** уравнение состояния, фазовый переход, двухфазная область жидкость-пар, аппроксимация границы двухфазной области.

## ALGORITHMS FOR CALCULATING THERMODYNAMIC FUNCTIONS IN THE TWO-PHASE LIQUID-VAPOR REGION

*Danilov Artem Sergeevich (ASDanilov@vniief.ru), Kudelkin Vadim Grigoryevich,  
Gordeev Dmitry Gennadyevich, Zhilnikova Natalia Nikolaevna*

FSUE «RFNC-VNIIEF», Sarov Nizhny Novgorod region

The paper describes algorithms for calculating thermodynamic functions at the boundary of a two-phase liquid-vapor region. The calculation results of thermodynamic functions at the boundary are approximated using splines with automatic node placement. Then the constructed approximations are used to check if the input parameters match the states inside the two-phase region and also as an initial estimate when calculating thermodynamic functions inside the two-phase region.

The developed algorithms are realized in the form of an independent software module that allows, together with semi-empirical equations of state, computing thermodynamic functions at the boundary and inside the phase transition for the input variables such as density-temperature, density-specific internal energy and density-pressure.

**Key words:** equation of state, phase transition, two-phase liquid-vapor region, boundary approximation of the two-phase region.

### Введение

Для решения многих прикладных задач, связанных с моделированием движения сжимаемых сред, необходимы уравнения состояния (УРС), описывающие поведение этих сред, как в однофазных областях, так и при фазовых переходах, в областях, где вещество находится в виде смеси фаз.

В научной литературе описаны различные модели УРС, разработанные, в том числе, и для описания поведения веществ при фазовых переходах [1], [2], [3], [4]. Алгоритмы вычисления термодинамических функций (ТДФ) на фазовых переходах значительно усложняют УРС и могут влиять на продолжительность расчетов.

Доклад посвящен описанию алгоритмов, позволяющих выполнять расчет ТДФ на границе двухфазной области жидкость-пар и их аппроксимацию с необходимой точностью на стадии расчета начальных данных (РНД), непосредственно перед использованием УРС в расчетах.

В данной работе развиты идеи и подходы, ранее применявшиеся в [5] для аппроксимации ТДФ на границе фазового перехода жидкость-пар. В сравнении с [5] были разработаны новые алгоритмы расчета и аппроксимации ТДФ на границе, итерационного уточнения положения границы при вычислении ТДФ внутри двухфазной области.

Аппроксимация ТДФ на границе требуется для предварительной оценки попадания в двухфазную область на стадии расчета ТДФ по УРС. По результатам оценки производится итерационное уточнение значений ТДФ на границе относительно аппроксимаций. Если по результатам уточнения установлено попадание в двухфазную область, то расчет ТДФ внутри нее производится с использованием найденных значений ТДФ на границе, соответствующим входным параметрам УРС.

Разработанные алгоритмы ориентированы на использование с полуэмпирическими УРС, которые удовлетворяют ряду требований:

- уравнение состояния должно быть термодинамически согласованным [6];

- должно позволять рассчитывать зависимости давления  $P$ , удельной внутренней энергии  $E$  от плотности  $\rho$  и температуры  $T$ , их производных по плотности и температуре и энтропии  $S$ ;

- рассчитанные по УРС изотермы при плотности меньше кристаллической и температурах ниже критической должны иметь участки в виде петель Ван-дер-Ваальса (см. рис. 1).

Таким образом, алгоритмы не зависят от формы модели УРС.

### Особенности изменения термодинамических функций при фазовом переходе жидкость-пар

Характерное положение в координатах плотность-давление границы двухфазной области жидкость-пар (бинодали) при фазовом переходе показано на рис. 1.

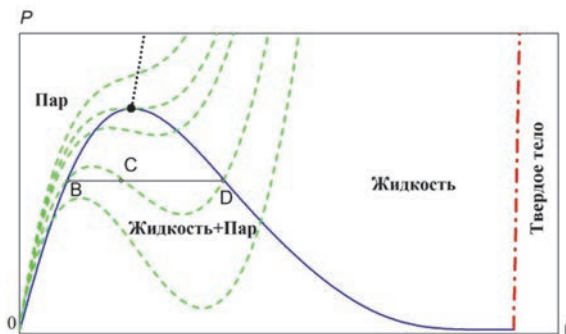


Рис. 1. Зависимость давления от плотности на изотермах и на границе двухфазной области

На графике можно отметить несколько точек: ● критическая точка; — граница двухфазной области жидкость-пар (бинодаль); - - - - - изотермы; ····· критическая изэнтропа; - · - · - · линия плавления; BCD – участок изотермы, реализующейся при равновесном фазовом переходе.

При температуре меньше критической изотермы имеют волнообразную форму (петли Ван-дер-Ваальса), отображающую неустойчивое, метастабильное состояние вещества. Можно выделить три участка изотерм (см. рис. 1), из которых два находятся за пределами двухфазной области, а участок  $BD$  – в двухфазной области. Точки  $B$  и  $D$  принадлежат бинодали. В реализованном программном модуле моделируются равновесные состояния при фазовом переходе, лежащие на прямой  $BD$ .

Граница двухфазной области в переменных  $\rho$ - $P$  и  $\rho$ - $E$  имеет разное положение в зависимости от того производится ли учет вклада равновесного излучения при расчете  $P$  и  $E$  по УРС. Под учетом вклада равновесного излучения для УРС понимается добавка к составляющим давления и удельной внутренней энергии в соответствии с законом Стефана-Больцмана:

$$P_f(T) = \frac{aT^4}{3}; E_f(\rho, T) = \frac{aT^4}{\rho}, \quad (1)$$

где  $a=4\sigma/c$  – постоянная плотности излучения,  $\sigma$  – постоянная Стефана-Больцмана,  $c$  – скорость света в вакууме.

На рис. 2 приведено сравнение положений границ двухфазной области с учетом вклада равновесного излучения и без учета для  $\rho$ - $E$  переменных (рис. 2,а) и  $\rho$ - $P$  переменных (рис. 2,б).

В переменных  $\rho$ - $E$  при учете вклада излучения энергия  $E \rightarrow \infty$  на границе двухфазной области при стремлении плотности со стороны пара к нулю. В переменных  $\rho$ - $P$  при низких значениях плотности границы двухфазных областей с учетом вклада излучения и без учета отличаются на несколько порядков со стороны пара. В переменных  $\rho$ - $T$  вклад равновесного излучения не оказывает влияния на положение границы двухфазной области.

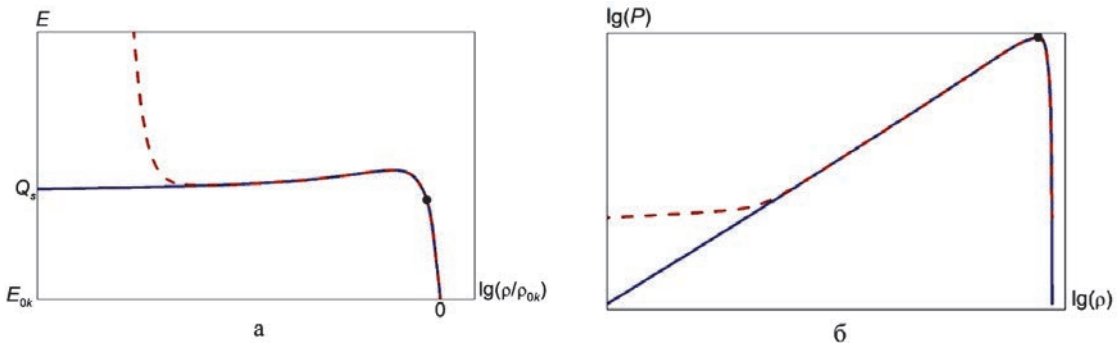


Рис. 2. Сравнение положений границ двухфазной области с учетом вклада равновесного излучения и без учета: а –  $\rho$ - $E$  переменные, б –  $\rho$ - $P$  переменные: ● критическая точка; - - - граница двухфазной области с учетом излучения; — граница двухфазной области без учета излучения.  $\rho_{ок}$  – кристаллическая плотность вещества;  $E_{ок}$  – рассчитанное по УРС значение энергии при кристаллической плотности вещества и нулевой температуре;  $Q_s$  – энергия связи вещества

### Определение положения критической точки уравнения состояния

На этапе РНД для расчета ТДФ на границе двухфазной области предварительно необходимо определить значения плотности  $\rho_c$  и температуры  $T_c$  в критической точке, т. к. из малой ее окрестности начинается расчет ТДФ для газовой и жидкостной веток границы.

В критической точке должны выполняться следующие соотношения [7]:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T = 0; \quad \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_T = 0; \quad \left(\frac{\partial^3 P}{\partial \rho^3}\right)_T > 0. \quad (2)$$

Для определения критической точки с помощью метода секущих относительно переменных плотность-температура решается система уравнений, составленная из первых двух выражений (2). В ходе решения системы значения необходимых ТДФ и их производных рассчитываются с использованием заданного УРС в однофазном приближении в  $\rho$ - $T$  переменных. Производные порядка выше первого вычисляются численно по разностной формуле второго порядка точности с уточнением по методу Рунге-Ромберга [8].

В методе секущих необходимо задавать два начальных приближения для каждой искомой величины. Первое начальное приближение рассчитывается относительно задаваемого нулевого:  $\rho^1=0,9\rho^0$ ,  $T^1=0,75T^0$ . Нулевое начальное приближение задается следующим образом:  $\rho^0=0,185\rho_{melt}$ ,  $T^0=T_{melt}/0,15$ . Здесь  $\rho_{melt}$  и  $T_{melt}$  – значения плотности и температуры в точке начала плавления при нормальных условиях, известные из справочных данных. Используя найденные значения  $\rho_c$ ,  $T_c$  в качестве входных переменных по заданному УРС в однофазном приближении, рассчитываются значения давления в критической точке  $P_c$  и удельной внутренней энергии  $E_c$ .

### Расчет термодинамических функций на границе двухфазной области жидкость-пар

После нахождения критической точки на этапе РНД производится расчет ТДФ на границе фазового перехода жидкость-пар. Для этого используется условие равенства потенциалов Гиббса  $\Phi$  и давлений на границе [9]:

$$\begin{cases} P(\rho_L, T) = P(\rho_V, T) \\ \Phi(\rho_L, T) = \Phi(\rho_V, T) \end{cases}, \quad (3)$$

где  $\Phi(\rho, T) = E(\rho, T) - T \times S(\rho, T) + P(\rho, T)/\rho$ .

Здесь и в дальнейшем индексом  $L$  (Liquid) будет обозначаться принадлежность к жидкой фазе, а индексом  $V$  (Vapor) – к газообразной.

Система (3) решается методом Ньютона при задаваемом параметре  $\rho_V$ , т. к. вычисление значений плотности пара при низких значениях давления является затруднительным в силу того, что данная переменная меняется в ходе расчетов на много порядков. Для расчета всех необходимых ТДФ используется заданный однофазный УРС в переменных  $\rho$ - $T$ . Последовательно задавая различные значения  $\rho_V$  из интервала  $(0, \rho_c)$  и решая систему уравнений (3) при этих значениях, определяются значения ТДФ ( $\rho_V$ ,  $\rho_L$ ,  $T$ ,  $P$ ,  $E_V$  – удельная внутренняя энергия со стороны пара,  $E_L$  – удельная внутренняя энергия со стороны жидкости) на границе двухфазной области.

Существует альтернативный вариант нахождения границы двухфазной области при помощи правила Максвелла [1], [9], для которого не требуется знания энтропии вещества. Однако в таком случае требуется вычисление интеграла, определение которого с заданной точностью при низких давлениях сопряжено с большими вычислительными затратами.

Определение достаточно точного начального приближения при решении системы уравнений (3) методом Ньютона важно, потому что, как видно из данной системы, при любом значении  $T$  решением может являться  $\rho_V = \rho_L$ , которое легко получить вбли-

зи критической точки, где  $\rho_V$  и  $\rho_L$  очень близки друг к другу. Поэтому, определению первого значения плотности пара  $\rho_{V1}$  близкому к значению плотности в критической точке необходимо уделить особое внимание.

Первое значение параметра  $\rho_{V1}$  подбирается до тех пор, пока не будет найдено нетривиальное ( $\rho_V \neq \rho_L$ ) решение системы уравнений (3). Начиная со значения:

$$\rho_{V1} = 0,995\rho_c, \quad (4)$$

проводится пробное решение (3). Пока нетривиальное решение не будет найдено,  $\rho_{V1}$  корректируется по следующему правилу:

$$\rho_{V1} = \rho_{V1} - 0,0025\rho_c. \quad (5)$$

Начальные приближения для переменных  $T$  и  $\rho_L$  при решении системы (3) с заданным параметром  $\rho_{V1}$  находятся исходя из разложения функции  $P(\rho, T)$  в ряд Тейлора в окрестности критической точки и того факта, что в малой окрестности критической точки в системе координат  $\rho$ - $T$  граница имеет форму параболы [10]. Выражения для начальных приближений  $T_1$  и  $\rho_{L1}$  имеют следующий вид:

$$T_1 = T_c - \frac{1}{6} \frac{\partial^3 P(\rho_c, T_c)}{\partial \rho^3} (\Delta\rho)^2 \Big/ \frac{\partial^2 P(\rho_c, T_c)}{\partial \rho \partial T}; \quad (6)$$

$$\rho_{L1} = \rho_c + \Delta\rho; \quad (7)$$

где  $\Delta\rho = \rho_c - \rho_{V1}$ .

Производные  $P''_{\rho\rho\rho}$  и  $P''_{\rho T}$  в выражении (6) находятся численно по разностной формуле второго порядка точности с уточнением по методу Рунге-Ромберга [8].

После решения системы (3) относительно  $T$  и  $\rho_L$  при заданном значении  $\rho_{V1}$  задается новое значение плотности пара, при котором необходимо решить систему. Начальным приближением при текущем значении плотности пара выбирается решение системы при предыдущем значении плотности пара.

Сетка для дальнейшего изменения параметра  $\rho_V$  подбиралась специальным образом для обеспечения построения достаточно точных аппроксимаций ТДФ на границе фазового перехода. Все константы в выражениях (8) – (13) были подобраны в результате исследования их влияния на точность аппроксимаций и затраты времени на вычисление ТДФ в двухфазной области для более 50 УРС.

Значения параметра  $\rho_{Vi}$  ( $i=2, 3, 4, \dots$ ) задаются исходя из линейной экстраполяции  $\rho_V(\rho_L)$  (в логарифмическом масштабе по  $\rho_V$ ):

$$\rho_{Vi} = \exp \left[ \frac{\rho_{Li} - \rho_{L(i-2)}}{\rho_{L(i-1)} - \rho_{L(i-2)}} (\ln \rho_{V(i-1)} - \ln \rho_{V(i-2)}) + \ln \rho_{V(i-2)} \right], \quad (8)$$

где  $\rho_{Li} = \rho_{L(i-1)} + 0,01\rho_c$ ,  $\rho_{V0} = \rho_{L0} = \rho_c$ .

Если на каком-либо шаге вычисления  $\rho_{Vi}$  по формуле (8) выполняется:

$$0,9\rho_c < \rho_{Vi} < 0,995\rho_{V(i-1)}, \quad (9)$$

то значение  $\rho_{Vi}$  вычисляется по формуле:

$$\rho_{Vi} = 0,995\rho_{V(i-1)}. \quad (10)$$

Если на каком-либо шаге вычисления  $\rho_{Vi}$  по формуле (8) выполняется:

$$\begin{cases} \rho_{Vi} < 0,01\rho_c \\ \rho_{Vi} < 0,75\rho_{V(i-1)} \end{cases}, \quad (11)$$

то значение  $\rho_{Vi}$  вычисляется по формуле:

$$\rho_{Vi} = 0,75\rho_{V(i-1)}. \quad (12)$$

Формула линейной экстраполяции (8) позволяет сгущать сетку по  $\rho_V$  в областях, где  $dT/d\rho_L$  близко к нулю (это области вблизи критической и тройной точек). Если сгущения сетки вблизи критической точки по формуле (8) недостаточно, то применяется сгущение по формуле (10). Помимо этого, сетка все больше сгущается при уменьшении  $T$  за счет формулы (12). Сгущение сетки в этих областях необходимо, чтобы построить достаточно точные аппроксимации зависимостей ТДФ на границе фазового перехода.

Расчет ТДФ на границе двухфазной области продолжается до тех пор, пока не выполнится условие:

$$P(\rho_{Vi}, T_i) - P_f(T_i) < P_{limit}, \quad (13)$$

где  $T_i$  – найденное значение температуры на границе двухфазной области при заданном значении параметра  $\rho_{Vi}$ ,  $P_{limit}$  – задаваемый параметр, по умолчанию равный  $4 \times 10^{-11}$  Па.

### Аппроксимация термодинамических функций на границе двухфазной области жидкость-пар

Аппроксимация ТДФ на границе двухфазной области необходима для оценки попадания расчетной точки в двухфазную область на стадии расчета ТДФ по уравнению состояния, а также для получения начальных приближений при расчете ТДФ внутри двухфазной области. Для разных типов входных переменных уравнения состояния используются аппроксимации разных зависимостей на границе фазового перехода. На этапе РНД проводится аппроксимация для следующих зависимостей на границе фа-

зового перехода:  $\rho_V(T), \rho_L(T), \rho_V(P), \rho_L(P), T(P), E(\rho)$ .

Также проводится аппроксимация  $E(\rho, T)$  внутри двухфазной области.

Аппроксимация приведенных выше зависимостей проводится с помощью метода построения кубического сплайна с выбором узлов в точках с максимальной погрешностью. Данный метод основан на построении интерполяционного кубического сплайна класса  $C^2$  [11], обеспечивающий непрерывность второй производной аппроксимаций. Граничные условия задаются в виде значений первых производных. Подбор числа узлов сплайна производится автоматически. Число узлов увеличивается, пока не будет получена аппроксимация значений функции в точках на границе двухфазной области с точностью не хуже заданного значения  $\epsilon$ . В качестве начальных фиксированных узлов задаются левая  $(x_1, y_1)$  и правая  $(x_n, y_n)$  граничные точки. Используя начальные данные, строится сплайн, значения которого в точках  $x_i$  сравниваются с соответствующими значениями  $y_i$  таблицы значений функции  $y(x)$ . Далее ищется точка из числа точек таблицы значений функции  $y(x)$ , где достигается максимальная относительная погрешность сплайна. Если погрешность больше заданного значения  $\epsilon$ , то точка, в которой эта максимальная погрешность достигается, фиксируется в качестве нового узла. Сплайн перестраивается, и процедура добавления узлов продолжается до тех пор, пока не будет построена аппроксимация таблицы значений функции  $y(x)$  с точностью не хуже заданного значения  $\epsilon$ .

В критической точке на границе двухфазной области первая производная для зависимостей  $\rho(T)$  и  $\rho(P)$  обращается в бесконечность [7]. Поэтому, чтобы аппроксимировать зависимости  $\rho_V(T), \rho_L(T), \rho_V(P), \rho_L(P)$  кубическим сплайном, сначала проводится их преобразование (см. табл. 1), которое позволяет получить конечную первую производную в критической точке. После получения преобразованных зависимостей проводится их сплайн-аппроксимация.

Аппроксимация функций  $F(T), G(T)$  сплайнами проводится от минимально рассчитанной температуры на границе до критической точки. Производная на левой границе сплайнов задается с использованием интерполяции параболой крайних левых точек.

На правой границе в силу того, что в малой окрестности критической точки в системе координат  $\rho$ - $T$  граница имеет форму параболы, производная будет равна  $r$  для  $F(T)$  и  $-r$  для  $G(T)$ , где

$$r = \sqrt{6T_c \frac{\partial^2 P(\rho_c, T_c)}{\partial \rho \partial T} \left/ \left( \rho_c^2 \frac{\partial^3 P(\rho_c, T_c)}{\partial \rho^3} \right) \right.}.$$

Аппроксимация функций  $H(x), J(x)$  сплайнами проводится от минимального рассчитанного давления на границе до критической точки. Производная на левой границе сплайнов задается с использованием интерполяции параболой крайних левых точек, на правой – равной  $q$  для  $H(x)$  и  $-q$  для  $J(x)$ ,

$$\text{где } q = \sqrt{6P_c \frac{T_c - T_1}{P_c - P_1} \frac{\partial^2 P(\rho_c, T_c)}{\partial \rho \partial T} \left/ \left( \rho_c^2 \frac{\partial^3 P(\rho_c, T_c)}{\partial \rho^3} \right) \right.},$$

так как давление вблизи критической точки на кривой фазового равновесия может считаться линейной функцией температуры [10].

Зависимости  $T(P), E(\rho)$  аппроксимируются сплайнами без преобразования функций, т. к. для данных зависимостей производная не обращается в бесконечность в критической точке. Аппроксимация данных зависимостей проводится в логарифмическом масштабе по оси  $X$ . Производные на левой и правой границах сплайнов задаются с использованием интерполяции параболой крайних точек.

Энергия в зависимости от плотности и температуры в двухфазной области вычисляется следующим образом:

$$E(\rho, T) = \frac{E(\rho_L, T)\rho_L - E(\rho_V, T)\rho_V}{\rho_L - \rho_V} + \frac{\rho_L \rho_V [E(\rho_V, T) - E(\rho_L, T)]}{(\rho_L - \rho_V)\rho}, \quad (14)$$

где  $\rho_L = \rho_L(T)$  и  $\rho_V = \rho_V(T)$ .

Для получения аппроксимации  $E(\rho, T)$  проводится аппроксимация входящих в ее состав функций  $A(T)$  и  $B(T)$  сплайнами с общими узлами:

$$A(T) = \frac{E_L(T)\rho_L(T) - E_V(T)\rho_V(T)}{E_c [\rho_L(T) - \rho_V(T)]}; \quad (15)$$

$$B(T) = \frac{\rho_L(T)\rho_V(T)[E_V(T) - E_L(T)]}{\rho_c E_c [\rho_L(T) - \rho_V(T)]}.$$

Таблица 1

Преобразование зависимостей ТДФ на границе фазового перехода для последующей аппроксимации

Зависимость	Преобразование (аппроксимируемая функция)
$\rho_V(T)$	$F(T) = \ln(\rho_V(T) / \rho_c) \sqrt{1 - T / T_c}$
$\rho_L(T)$	$G(T) = (\rho_L(T) / \rho_c - 1) \sqrt{1 - T / T_c}$
$\rho_V(P)$	$H(x) = \ln(\rho_V(x) / \rho_c) \sqrt{1 - \exp(x)}$ , где $x = \ln(P / P_c)$
$\rho_L(P)$	$J(x) = (\rho_L(x) / \rho_c - 1) \sqrt{1 - \exp(x)}$ , где $x = \ln(P / P_c)$

## Расчет термодинамических функций внутри двухфазной области жидкость-пар

Подготовленные на этапе РНД аппроксимации используются на стадии регулярного счета для вычисления ТДФ внутри двухфазной области. Сначала с использованием аппроксимаций проводится анализ исходных данных на предмет их соответствия термодинамическим состояниям внутри двухфазной области. Если установлено попадание в двухфазную область, то расчет ТДФ внутри двухфазной области производится с помощью значений ТДФ на бинадали, соответствующих входным параметрам УРС. Чтобы повысить точность расчета ТДФ внутри двухфазной области в переменных  $\rho$ - $E$  и  $\rho$ - $P$  производится итерационное уточнение значений ТДФ на бинадали относительно полученных по аппроксимациям. В переменных  $\rho$ - $T$  после определения соответствия заданных значений входных переменных УРС состояниям в двухфазной области итерационное уточнение ТДФ на бинадали не проводится, расчет ТДФ внутри двухфазной области производится с использованием аппроксимаций  $\rho_V(T)$  и  $\rho_L(T)$ . Точность расчетов ТДФ в таком случае зависит от точности полученных аппроксимаций. Это сделано для ускорения расчетов в данных переменных.

Для уточнения значений ТДФ на границе в переменных  $\rho$ - $E$  и  $\rho$ - $P$  методом Ньютона решаются следующие системы уравнений:

$$\begin{cases} P(\rho_L, T) = P(\rho_V, T) \\ \Phi(\rho_L, T) = \Phi(\rho_V, T) \\ E(\rho_L, T) - [E(\rho_L, T) - E(\rho_V, T)](1 - \alpha) = E \end{cases}, \quad (16)$$

где  $\alpha(\rho, \rho_V, \rho_L) = \left( \frac{\rho_V - \rho}{\rho_V - \rho_L} \right) \frac{\rho_L}{\rho}$  – массовая доля жидкости в смеси;

$$\begin{cases} P(\rho_L, T) = P \\ P(\rho_V, T) = P \\ \Phi(\rho_L, T) = \Phi(\rho_V, T) \end{cases}. \quad (17)$$

Система (16) решается в  $\rho$ - $E$  переменных, система (17) – в  $\rho$ - $P$  переменных. На каждой итерации решения систем для расчета необходимых ТДФ производится по два вызова УРС в однофазном приближении в переменных  $\rho$ - $T$ . В качестве начальных приближений используются полученные на этапе РНД аппроксимации. В табл. 2 приведено, какие аппрок-

симации используются для различных типов входных переменных УРС.

В  $\rho$ - $E$  переменных перед решением системы (16), чтобы задать начальное приближение для  $T$ , методом Ньютона решается кубическое уравнение для заданной энергии внутри двухфазной области, используя аппроксимацию  $E(\rho, T)$  (14), (15).

После решения системы (16) или (17) и определения значений  $T$ ,  $\rho_V$ ,  $\rho_L$  находится значение доли жидкой фазы  $\alpha$  и проводится окончательная оценка попадания в двухфазную область. Если  $\alpha < 0$  или  $\alpha > 1$ , то расчет ТДФ производится по УРС за пределами двухфазной области. Если полученное значение  $\alpha$  находится в интервале  $0 \leq \alpha \leq 1$ , то производится расчет ТДФ в двухфазной области по приведенным ниже формулам:

$$P = P(\rho_V, T); \quad (18)$$

$$E = \alpha(\rho, \rho_V, \rho_L) E(\rho_L, T) + [1 - \alpha(\rho, \rho_V, \rho_L)] E(\rho_V, T); \quad (19)$$

$$S = \alpha(\rho, \rho_V, \rho_L) S(\rho_L, T) + [1 - \alpha(\rho, \rho_V, \rho_L)] S(\rho_V, T); \quad (20)$$

$$\left( \frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = 0; \quad (21)$$

$$\left( \frac{\partial E}{\partial \rho} \right)_T = \frac{d\alpha}{d\rho} (E(\rho_L, T) - E(\rho_V, T)). \quad (22)$$

Для расчета квадрата изэнтропической скорости звука  $C$  используется приближенная формула [5]:

$$C^2 = 1 / \left( \rho \left( \frac{\rho_L(\rho - \rho_V)}{\rho_L^2(\rho_L - \rho_V) C^2(\rho_L, T)} + \frac{\rho_V(\rho_L - \rho)}{\rho_V^2(\rho_L - \rho_V) C^2(\rho_V, T)} \right) \right); \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial E}{\partial T} \right)_\rho = & \alpha \left( \left( \frac{\partial E(\rho_L, T)}{\partial \rho_L} \right)_T \frac{d\rho_L}{dT} + \left( \frac{\partial E(\rho_L, T)}{\partial T} \right)_{\rho_L} \right) + \\ & + \frac{d\alpha}{dT} (E(\rho_L, T) - E(\rho_V, T)) + \\ & + (1 - \alpha) \left( \left( \frac{\partial E(\rho_V, T)}{\partial \rho_V} \right)_T \frac{d\rho_V}{dT} + \left( \frac{\partial E(\rho_V, T)}{\partial T} \right)_{\rho_V} \right). \end{aligned} \quad (24)$$

Таблица 2

Используемые аппроксимации для различных типов входных переменных УРС

Входные переменных УРС	$\rho$ - $T$	$\rho$ - $P$	$\rho$ - $E$
Используемые аппроксимации	$\rho_V(T), \rho_L(T)$	$\rho_V(P), \rho_L(P), T(P)$	$E(\rho), E(\rho, T), \rho_V(T), \rho_L(T)$

Производные  $\frac{d\rho_L}{dT}$ ,  $\frac{d\rho_V}{dT}$  в  $\rho$ - $E$  и  $\rho$ - $P$  переменных находятся на основе закона Клайперона-Клаузиуса [9]:

$$\frac{d\rho_L}{dT} = \frac{\left( \frac{S(\rho_V, T) - S(\rho_L, T)}{1/\rho_V - 1/\rho_L} - \left( \frac{\partial P(\rho_L, T)}{\partial T} \right)_{\rho_L} \right)}{\left( \frac{\partial P(\rho_L, T)}{\partial \rho_L} \right)_T}; \quad (25)$$

$$\frac{d\rho_V}{dT} = \frac{\left( \frac{S(\rho_V, T) - S(\rho_L, T)}{1/\rho_V - 1/\rho_L} - \left( \frac{\partial P(\rho_V, T)}{\partial T} \right)_{\rho_V} \right)}{\left( \frac{\partial P(\rho_V, T)}{\partial \rho_V} \right)_T}. \quad (26)$$

В  $\rho$ - $T$  переменных производные  $\frac{d\rho_L}{dT}$ ,  $\frac{d\rho_V}{dT}$  равны производным сплайн-аппроксимаций  $\rho_L(T)$ ,  $\rho_V(T)$ , соответственно.

В  $\rho$ - $E$  и  $\rho$ - $P$  переменных:

$$\left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho = \frac{dP}{dT} = \frac{S(\rho_V, T) - S(\rho_L, T)}{1/\rho_V - 1/\rho_L}. \quad (27)$$

В переменных  $\rho$ - $T$ :

$$\left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho = \frac{dP}{dT} = \left( \frac{\partial P(\rho_V, T)}{\partial T} \right)_{\rho_V} + \frac{d\rho_V}{dT} \left( \frac{\partial P(\rho_V, T)}{\partial \rho_V} \right)_T. \quad (28)$$

### Заключение

Разработаны алгоритмы, позволяющие выполнять расчет ТДФ на границе двухфазной области жидкость-пар и их аппроксимацию с необходимой точностью. Алгоритмы не зависят от формы модели УРС и реализованы в виде отдельного программного модуля, позволяющего совместно с полуэмпирическими уравнениями состояния рассчитывать ТДФ на границе и внутри фазового перехода жидкость-пар для входных переменных плотность-температура, плотность-удельная внутренняя энергия и плотность-давление.

Работоспособность разработанного программного модуля подтверждена при его совместном использовании с уравнениями состояния различных веществ.

1. Фомин В. М., Куропатенко В. Ф., Сапожников Г. А. и др. Высокоскоростное взаимодействие тел. Новосибирск: Изд-во СО РАН, 1999.

2. Валько В. В., Ломоносов И. В., Острик А. В., Фортов В. Е., Хищенко К. В. Широкодиапазонные уравнения состояния конструкционных материалов. Физика ядерного взрыва. В 5-ти томах. Т. 2. Действие взрыва. МЖФизматлит, 2010. С. 140–228.

3. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Каякин А. А., Куделькин В. Г. Модель уравнения состояния металлов с эффективным учетом ионизации. Уравнения состояния Та, W, Al, Be // Физика горения и взрыва. 2013. № 1. С. 106–120.

4. Елькин В. М., Михайлов В. Н., Михайлова Т. Ю. Полуэмпирическое уравнение состояния твердых  $\alpha$ -,  $\omega$ -,  $\beta$  – фаз титана и жидкости с учетом испарения // Вопросы атомной науки и техники. Сер.: Теоретическая и прикладная физика. 2017. Вып. 1. С. 28–42.

5. Гударенко Л. Ф., Жеребцов В. А. Способ расчета термодинамических функций в двухфазной области жидкость-пар с использованием сплайн-аппроксимации // Вопросы атомной науки и техники. Серия: Математическое моделирование физических процессов. 1994. Вып. 1. С. 3–7.

6. Базаров И. П. Термодинамика. М.: Высшая школа, 1991.

7. Анисимов М. Ф., Рабинович В. А., Сычев В. В. Термодинамика критического состояния индивидуальных веществ. М.: Энергоатомиздат., 1990.

8. Калиткин Н. Н. Численные методы. М.: Наука, 1978.

9. Филиппов Л. И. Методы расчета и прогнозирования свойств веществ. М.: Издательство московского университета, 1998.

10. Вукалович М. П., Новиков И. И. Термодинамика: Учеб. пособие для вузов. М.: Машиностроение, 1972.

11. Амосов А. А., Дубинский Ю. А., Копченова Н. В. Вычислительные методы для инженеров: Учеб. пособие. М.: Высш. шк., 1994.