

УДК 536.715

МЕТОД ПОСТРОЕНИЯ ШИРОКОДИАПАЗОННЫХ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИ СОГЛАСОВАННЫХ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ НА ОСНОВЕ ЛОКАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЙ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОДЕЛИ СМЕСИ

Л. Ф. Гударенко, В. Г. Куделькин
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Описан способ построения термодинамически согласованных глобальных уравнений состояния, основанный на *шивке* локальных уравнений состояния с использованием одной из моделей смеси. Представлены алгоритмы расчета термодинамических функций в переходной области на примере сшивки двух уравнений состояния при различной конфигурации границ переходной области. Предлагается также обобщение этих алгоритмов на случай нескольких уравнений. На примере построения широкодиапазонного уравнения состояния алюминия продемонстрированы возможности данного способа. Представлены графики поведения термодинамических функций и ударных адиабат, рассчитанных как по широкодиапазонному, так и по исходным уравнениям состояния.

Ключевые слова: широкодиапазонное уравнение состояния, модель смеси, термодинамические функции, алюминий

Существует класс конструкций, эффективность работы которых в числе других факторов определяется термодинамическими свойствами используемых материалов при воздействии на них интенсивных динамических нагрузок. При математическом моделировании работы этих конструкций термодинамические свойства материалов задаются уравнениями состояния (УРСами), которые замыкают систему уравнений движения. От того, насколько адекватно описываются УРСами реальные свойства материалов, во многом зависит точность расчета различных режимов работы конструкций. В связи с этим актуальной является задача разработки более точных УРСов, которые описывают всю область изменения термодинамических параметров, реализующуюся при работе рассчитываемых конструкций. Пока не разработана хорошо обоснованная и оттестированная единая модель, которая позволяла бы строить широкодиапазонные УРСы для расчета термодинамических функций (ТДФ) веществ в диапазоне изменения состояний от близких к нормальным до соответствующих сверхвысоким концентрациям энергии.

Одним из препятствий на пути разработки таких моделей является то, что к настоящему времени существует довольно значительная промежуточная область, которая недостижима для экспериментальных исследований и находится за пределами применимости современных теоретических моделей УРСов.

Обычно используемая технология построения широкодиапазонных (глобальных) УРСов — это технология разработки табличных УРСов с использованием расчетов по нескольким локальным УРСам [1–7]. Значения ТДФ в узлах заданной сетки рассчитываются по локальным УРСам. Затем выполняется процедура сглаживания данных и заполнения недостающих данных значениями, получаемыми с использованием разных алгоритмов интерполяции. Однако сложность описания промежуточных участков фазовой плоскости между областями применимости исходных УРСов зачастую приводит к аномалиям (термодинамической несогласованности, немонотонности, разрывам производных ТДФ), возникающим вследствие *шивки*. Это может создавать проблемы для прикладных программ, использующих такие УРСы.

В статье описывается метод, который состоит в том, что расчет ТДФ в переходной области проводится с помощью модели смеси на основе данных, полученных в расчетах по УРСам, справедливым в соседних областях.

Каждый УРС разрабатывается на основе некоторой модели поведения вещества и имеет свою область применимости, и в этом смысле он является локальным. На плоскости выделяются границы областей применимости выбранных локальных УРСов. Каждая область описывается своим УРСом. На рис. 1 в координатах *относительное сжатие* $\delta = \rho/\rho_0$ — *температура* T условно показано положение областей I и II применимости локальных УРСов, а также переходной области III: Γ_1 — верхняя граница области применимости УРСа, описывающего область I; Γ_2 — нижняя граница применимости УРСа, описывающего область II.

Для построения глобального УРСа необходимо ввести в области III функцию, обеспечивающую гладкий переход с УРСа, описывающего область I, на УРС, описывающий область II. Вид функции не должен зависеть от формы представления исходных УРСов. Идея предлагаемого метода состоит в том, чтобы рассчитывать ТДФ в переходной области на основе данных исходных УРСов в этой области с помощью модели смеси. То есть вещество в области III представляется смесью двух компонентов, ТДФ которых рассчитываются по исходным УРСам, причем на границах все ТДФ, рассчитанные по модели смеси и по заданным УРСам, должны совпадать.

Данный способ построения широкодиапазонных УРСов был предложен авторами в [8]. Там же проанализирована возможность использования ряда моделей для расчета ТДФ смесей. Показано, что при использовании формул для расчета непосредственно давления и энергии смеси получаемый УРС в переходной области не удовлетворяет основному термодинамическому тождеству, являющемуся следствием второго начала термодинамики для равновесных процессов:

$$P = \rho^2 \left(\frac{\partial E}{\partial \rho} \right)_T + T \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho . \quad (1)$$

Это связано с тем, что данные модели удовлетворяют условию термодинамической согласованности в случае, если концентрации компонентов смеси постоянны, $\alpha_i = \text{const}$. В рассматриваемом же случае концентрация есть функция плотности и температуры, что и является причиной невыполнения тождества (1). Следовательно, для получения термодинамически согласованного УРСа необходимо разработать модель для расчета ТДФ в переходной области, учитывающую изменение концентрации α в зависимости от плотности и температуры.

Для того чтобы построить термодинамически согласованный УРС, достаточно задать для него один из полных термодинамических потенциалов, а остальные ТДФ вычислять на его основе. Данный способ построения широкодиапазонного УРСа и был выбран. Для независимых переменных *плотность* — *температура* полным термодинамическим потенциалом является свободная энергия. Возьмем выражение для нее, используемое в модели, в которой в случае равных атомных весов компоненты смеси имеют одинаковые плотность и температуру, а давление смеси и ее энергия вычисляются простым суммированием соответствующих величин для компонентов в соответствии с их концентрациями [9]:

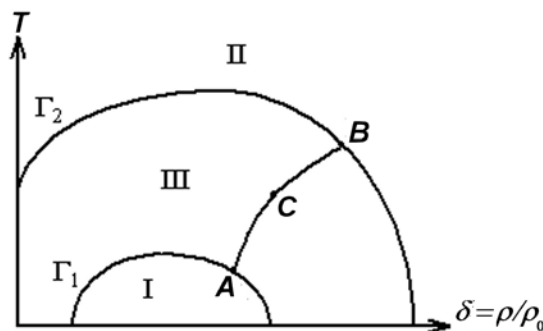


Рис. 1. Схема, иллюстрирующая положение переходной области и границ областей применимости локальных УРСов

$$F(\rho, T) = \alpha F_1(\rho, T) + (1 - \alpha) F_2(\rho, T). \quad (2)$$

Тогда выражения для давления и энергии в переходной области примут вид

$$P(\rho, T) = \rho^2 \left(\frac{\partial F}{\partial \rho} \right)_T = \rho^2 \left[\alpha(\rho, T) \left(\frac{\partial F_1}{\partial \rho} \right)_T + (1 - \alpha(\rho, T)) \left(\frac{\partial F_2}{\partial \rho} \right)_T + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \rho} \right)_T (F_1(\rho, T) - F_2(\rho, T)) \right];$$

$$E(\rho, T) = F(\rho, T) + T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_\rho = \alpha(\rho, T) F_1(\rho, T) + (1 - \alpha(\rho, T)) F_2(\rho, T) + T \left[\alpha(\rho, T) \left(\frac{\partial F_1}{\partial T} \right)_\rho + (1 - \alpha(\rho, T)) \left(\frac{\partial F_2}{\partial T} \right)_\rho + \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_\rho (F_1(\rho, T) - F_2(\rho, T)) \right].$$

Из связи давления, энергии и энтропии со свободной энергией для каждого УРСа получим окончательные выражения для расчета давления и энергии в переходной области:

$$P(\rho, T) = \alpha(\rho, T) P_1(\rho, T) + (1 - \alpha(\rho, T)) P_2(\rho, T) + \rho^2 \left(\frac{\partial \alpha}{\partial \rho} \right)_T \left[E_1(\rho, T) - E_2(\rho, T) + T(S_1(\rho, T) - S_2(\rho, T) + S_H) \right];$$

$$E(\rho, T) = F(\rho, T) - T \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_\rho = \alpha(\rho, T) E_1(\rho, T) + (1 - \alpha(\rho, T)) E_2(\rho, T) - T \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} \right)_\rho \left[E_1(\rho, T) - E_2(\rho, T) + T(S_1(\rho, T) - S_2(\rho, T) + S_H) \right]. \quad (3)$$

Константа S_H введена для согласования нормировки энтропии в сшиваемых УРСах. Поведение ТДФ каждого УРСа может быть нормировано на различные условия, и разность двух одинаковых ТДФ, вычисленных по разным УРСам, может быть значительной. Кроме того, разность энтропий входит в выражения (3) с множителем T , что может сильно повлиять на поведение ТДФ в промежуточной области.

Формулы (2), (3) могут быть обобщены на случай сшивки нескольких УРСов. Рассмотрим это на примере трех УРСов. В этом случае выражение для свободной энергии будет иметь вид

$$F(\rho, T) = \alpha_1 F_1(\rho, T) + \alpha_2 F_2(\rho, T) + (1 - \alpha_1 - \alpha_2) F_3(\rho, T).$$

Перепишем его следующим образом:

$$F(\rho, T) = \alpha_1 F_1(\rho, T) + (1 - \alpha_1) F_{23}(\rho, T),$$

т. е. вещество описывается как смесь двух компонентов. ТДФ первого рассчитываются непосредственно по его УРСу, а второго — как для двухкомпонентной смеси:

$$F_{23}(\rho, T) = \alpha'_2 F_2(\rho, T) + (1 - \alpha'_2) F_3(\rho, T), \quad \alpha'_2 = \frac{\alpha_2}{1 - \alpha_1}.$$

Для расчета ТДФ в области III необходимо ввести функцию α , удовлетворяющую следующим условиям:

$$0 < \alpha \Big|_{(\delta, T) \in \text{III}} < 1; \quad \alpha \Big|_{(\delta, T) \in \Gamma_1} = 1; \quad \alpha \Big|_{(\delta, T) \in \Gamma_2} = 0.$$

При таком определении α будет иметь смысл концентрации вещества, свойства которого описываются первым УРСом.

Если границы областей будут иметь простейшую конфигурацию, как показано на рис. 2, то подбор функции α не вызовет трудностей. Но если взять, например, границу Γ_1 из схемы на рис. 2, в, а

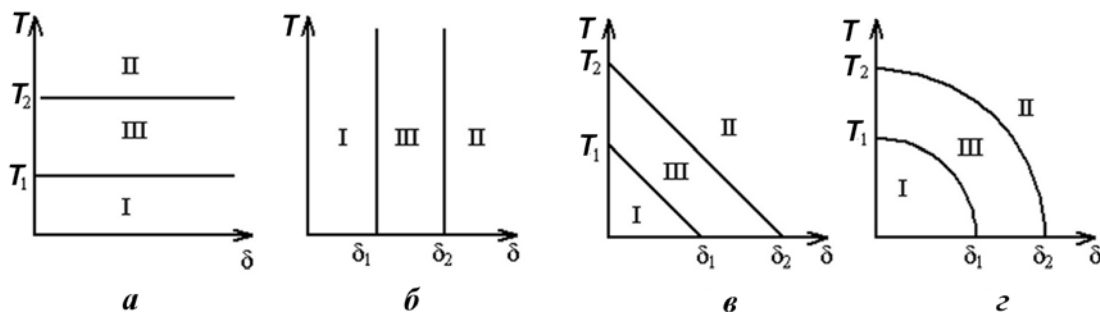


Рис. 2. Схемы, иллюстрирующие простейшие конфигурации границ областей применимости локальных УРСов

границу Γ_2 из схемы на рис. 2,з, то подобрать функцию, имеющую такие профили, будет сложной математической задачей.

Предлагается следующий способ построения функции концентраций. Продемонстрируем его суть на примере. Возьмем точку C , лежащую в промежуточной области (см. рис. 1), проведем через нее некую кривую, пересекающую границы областей в точках A и B . Тогда массовую концентрацию компонента смеси, ТДФ которого рассчитывается по УРСу области I, можно определить как отношение длины кривой BC к длине кривой AB :

$$\alpha = \frac{L_{BC}}{L_{AB}}.$$

Таким образом, для того чтобы определить функцию α во всей промежуточной области, достаточно построить непрерывное семейство непересекающихся кривых, однозначно отображающих границу Γ_1 на границу Γ_2 . Например, в случаях на рис. 2,а,б в качестве таких семейств можно взять семейства изохор и изотерм соответственно, в случаях рис. 2,в,з — семейство лучей, выходящих из точки $(0, 0)$. Тогда функцию α можно вычислять по следующим формулам:

$$a) \alpha = \frac{T_2 - T}{T_2 - T_1}; \quad б) \alpha = \frac{\delta_2 - \delta}{\delta_2 - \delta_1}; \quad в), з) \alpha = \sqrt{\frac{(T_B - T)^2 + (\delta_B - \delta)^2}{(T_B - T_A)^2 + (\delta_B - \delta_A)^2}}. \quad (4)$$

Воспользовавшись комбинацией формул (4), можно получить способ расчета функции концентраций в случае сшивки трех УРСов. Выберем границы применимости этих УРСов, как показано на рис. 3. Области применимости I, II, III закрашены. Разобьем промежуточную область на четыре части. Тогда концентрации можно вычислить по следующим формулам:

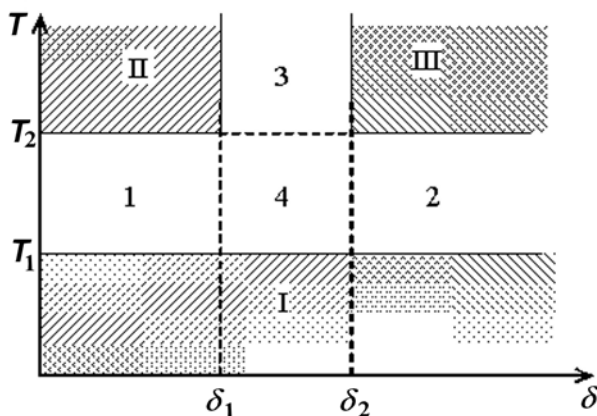


Рис. 3. Схема, иллюстрирующая простейшую конфигурацию границ областей применимости трех локальных УРСов

- область 1: $\alpha_1 = \frac{T_2 - T}{T_2 - T_1}$, $\alpha_2 = 1 - \alpha_1$, $\alpha_3 = 0$;
- область 2: $\alpha_1 = \frac{T_2 - T}{T_2 - T_1}$, $\alpha_2 = 0$, $\alpha_3 = 1 - \alpha_1$;
- область 3: $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = \frac{\delta_2 - \delta}{\delta_2 - \delta_1}$, $\alpha_3 = 1 - \alpha_2$;
- область 4: $\alpha_1 = \frac{T_2 - T}{T_2 - T_1}$, $\alpha_2 = \frac{T_2 - T}{T_2 - T_1} \cdot \frac{\delta_2 - \delta}{\delta_2 - \delta_1}$, $\alpha_3 = 1 - \alpha_1 - \alpha_2$.

Следующие особенности вида функции α выводятся из условия непрерывности давления и энергии на границах до вторых производных. Выражения для производных в модели (3) имеют следующий вид:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T = \alpha \left(\frac{\partial P_1}{\partial \rho}\right)_T + (1 - \alpha) \left(\frac{\partial P_2}{\partial \rho}\right)_T + 2\frac{\partial \alpha}{\partial \rho} (P_1 - P_2) + \left(2\rho\frac{\partial \alpha}{\partial \rho} + \rho^2\frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho^2}\right) (F_1 - F_2);$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho = \alpha \left(\frac{\partial P_1}{\partial T}\right)_\rho + (1 - \alpha) \left(\frac{\partial P_2}{\partial T}\right)_\rho + \frac{\partial \alpha}{\partial T} (P_1 - P_2) + \rho^2 \left[\frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho \partial T} (F_1 - F_2) - \frac{\partial \alpha}{\partial \rho} (S_1 - S_2 + S_H) \right];$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E}{\partial \rho}\right)_T &= \alpha \left(\frac{\partial E_1}{\partial \rho}\right)_T + (1 - \alpha) \left(\frac{\partial E_2}{\partial \rho}\right)_T + \frac{\partial \alpha}{\partial \rho} (E_1 - E_2) - \\ &\quad - T \left[\frac{\partial^2 \alpha}{\partial T \partial \rho} (F_1 - F_2) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial \alpha}{\partial T} (P_1 - P_2) \right]; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\rho &= \alpha \left(\frac{\partial E_1}{\partial T}\right)_\rho + (1 - \alpha) \left(\frac{\partial E_2}{\partial T}\right)_\rho + \frac{\partial \alpha}{\partial T} (E_1 - E_2) - \\ &\quad - T \frac{\partial \alpha}{\partial T} (S_1 - S_2 + S_H) - \left(\frac{\partial \alpha}{\partial T} + T \frac{\partial^2 \alpha}{\partial T^2} \right) (F_1 - F_2). \end{aligned}$$

На границах эти формулы переходят в следующие:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} = \left(\frac{\partial P_{1,2}}{\partial \rho}\right)_T + \frac{\partial \alpha}{\partial \rho} (\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho^2} (\dots);$$

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} = \left(\frac{\partial P_{1,2}}{\partial T}\right)_\rho + \frac{\partial \alpha}{\partial T} (\dots) + \frac{\partial \alpha}{\partial \rho} (\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho \partial T} (\dots);$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial \rho}\right)_T \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} = \left(\frac{\partial E_{1,2}}{\partial \rho}\right)_T + \frac{\partial \alpha}{\partial \rho} (\dots) + \frac{\partial \alpha}{\partial T} (\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial T \partial \rho} (\dots);$$

$$\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\rho \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} = \left(\frac{\partial E_{1,2}}{\partial T}\right)_\rho + \frac{\partial \alpha}{\partial T} (\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial T^2} (\dots).$$

Выражения для вторых производных можно записать в следующем виде:

$$\left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_T \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} = \left(\frac{\partial^2 P_{1,2}}{\partial \rho^2}\right)_T + \frac{\partial \alpha}{\partial \rho} (\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho^2} (\dots) + \frac{\partial^3 \alpha}{\partial \rho^3} (\dots);$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 P}{\partial T^2}\right)_\rho \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= \left(\frac{\partial^2 P_{1,2}}{\partial T^2}\right)_\rho + \frac{\partial \alpha}{\partial T}(\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial T^2}(\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho \partial T}(\dots) + \frac{\partial^3 \alpha}{\partial \rho \partial T^2}(\dots); \\ \left(\frac{\partial^2 E}{\partial \rho^2}\right)_T \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= \left(\frac{\partial^2 E_{1,2}}{\partial \rho^2}\right)_T + \frac{\partial \alpha}{\partial \rho}(\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho^2}(\dots) + \frac{\partial \alpha}{\partial T}(\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho \partial T}(\dots) + \frac{\partial^3 \alpha}{\partial \rho^2 \partial T}(\dots); \\ \left(\frac{\partial^2 E}{\partial T^2}\right)_\rho \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= \left(\frac{\partial^2 E_{1,2}}{\partial T^2}\right)_\rho + \frac{\partial \alpha}{\partial T}(\dots) + \frac{\partial^2 \alpha}{\partial T^2}(\dots) + \frac{\partial^3 \alpha}{\partial T^3}(\dots). \end{aligned}$$

Из выписанных формул видно: для того чтобы давление и энергия были непрерывны на границах до вторых производных, функция α на границах должна удовлетворять условиям

$$\begin{aligned} \frac{\partial \alpha}{\partial \rho} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0, & \frac{\partial \alpha}{\partial T} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0; \\ \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho^2} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0, & \frac{\partial^2 \alpha}{\partial T^2} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0, & \frac{\partial^2 \alpha}{\partial \rho \partial T} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0; \\ \frac{\partial^3 \alpha}{\partial \rho^3} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0, & \frac{\partial^3 \alpha}{\partial T^3} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0, & \frac{\partial^3 \alpha}{\partial \rho \partial T^2} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0, & \frac{\partial^3 \alpha}{\partial \rho^2 \partial T} \Big|_{\Gamma_1, \Gamma_2} &= 0. \end{aligned}$$

Представим α в виде сложной функции:

$$\alpha(\rho, T) = f(x(\rho, T)), \quad x = \frac{L_{AC}(\rho, T)}{L_{AB}(\rho, T)},$$

тогда достаточно построить функцию одной переменной, удовлетворяющую условиям

$$f(0) = 1; \quad f(1) = 0; \quad \frac{d^n f(0)}{dx^n} = \frac{d^n f(1)}{dx^n} = 0 \quad (n = 1, 2, 3).$$

В качестве такой функции выбран полином седьмой степени

$$f(x) = x^4(20x^3 - 70x^2 + 84x - 35) + 1. \quad (5)$$

При таком построении функции α точка, соответствующая значению $\alpha = 0,5$, лежит на равном расстоянии от границ. Практика же показала, что иногда целесообразно смещать ее в ту или иную сторону. Для этого введена еще одна функция, содержащая масштабирующий параметр k ($0 < k < 1$) [10]:

$$g(x) = \frac{(1-k)x}{k + (1-2k)x}. \quad (6)$$

То есть $\alpha = f(g(x))$. Заметим, что $g(x=0) = 0$, $g(x=1) = 1$, и при $k = 0,5$ получаем $g(x) = x$.

Покажем возможности разработанной методики на примере построения широкодиапазонного УРСа алюминия.

Для шивки выбраны полуэмпирический УРС РОСА-М, который позволяет рассчитывать состояния в области, хорошо исследованной в экспериментах с использованием ударных волн [11], и УРС, аппроксимирующий расчеты по теоретической модели ТФПК* и описывающий область сверхвысоких давлений, плотностей и удельных энергий.

При построении широкодиапазонного УРСа после выбора исходных, сшиваемых УРСов необходимо определить (задать) области их применимости и на основании этого определить границы переходной области.

*Модель Томаса—Ферми [12] с квантовыми и обменными поправками и с поправками, учитывающими вклад ядер по модели однокомпонентной плазмы ядер [13].

В области малых сжатий для оценки верхней границы применимости УРСа РОСА-М по температуре для каждого вещества рассчитывается температура на экспериментально исследованных ударных адиабатах сплошных и пористых образцов. Граница проводится таким образом, чтобы охватить точки, полученные в экспериментах. Граница применимости УРСа РОСА-М при больших плотностях и граница применимости УРСа ТФПК выбираются таким образом, чтобы в переходной области функции и их производные были монотонны. Выбранное в данном варианте положение границ переходной области для алюминия имеет вид, показанный на рис. 4.

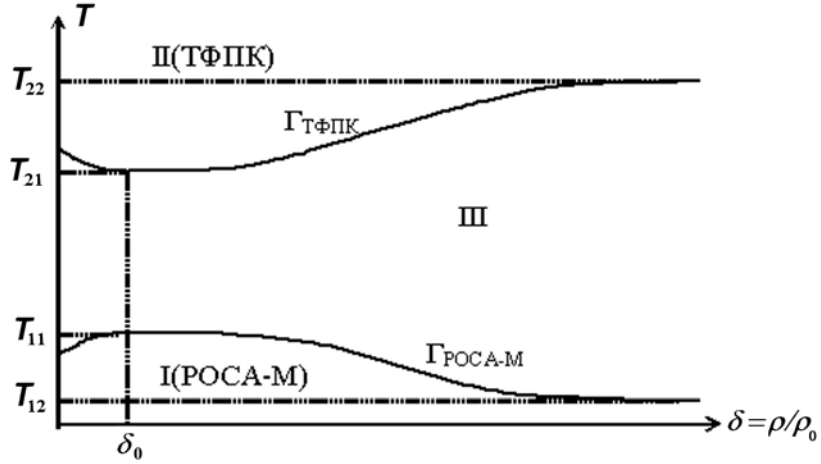


Рис. 4. Положение границ переходной области для алюминия

Функции, описывающие границы, представленные на рис. 4, имеют вид

$$T_{\Gamma_{\text{РОСА-М}}}(\delta) = \begin{cases} T_{11}[1 + c_{11}(\delta - \delta_0)^3], & \delta \leq \delta_0; \\ T_{12} + (T_{11} - T_{12}) \exp(-c_{12}(\delta - \delta_0)^3), & \delta > \delta_0; \end{cases}$$

$$T_{\Gamma_{\text{ТФПК}}}(\delta) = \begin{cases} T_{21}[1 + c_{21}(\delta - \delta_0)^3], & \delta \leq \delta_0; \\ T_{22} + (T_{21} - T_{22}) \exp(-c_{22}(\delta - \delta_0)^3), & \delta > \delta_0, \end{cases}$$

где $T_{11} = 0,01$ кэВ; $T_{12} = 0,005$ кэВ; $T_{21} = 0,2$ кэВ; $T_{22} = 0,5$ кэВ; $\delta_0 = 3$. Вид границ выбран таким образом, чтобы в точке δ_0 функции были непрерывны до вторых производных.

При построении широкодиапазонного УРСа алюминия методика сшивки была применена только для тепловых составляющих. В зависимости от попадания точки в ту или иную область расчет производится по соответствующим формулам. Для свободной энергии это можно записать следующим образом:

$$F(\rho, T) = \begin{cases} F(\rho, T) = F_{\text{РОСА-М}}(\rho, T), & \text{область I;} \\ E_{x(\text{РОСА-М})}(\rho) + \alpha F_{T(\text{РОСА-М})}(\rho, T) + (1 - \alpha) F_{T(\text{ТФПК})}(\rho, T), & \text{область III;} \\ F(\rho, T) = E_{x(\text{РОСА-М})}(\rho) + F_{T(\text{ТФПК})}(\rho, T), & \text{область II,} \end{cases}$$

где E_x — потенциальная (холодная) составляющая внутренней энергии; F_T — тепловая составляющая свободной энергии. Функция α вычисляется по формулам (5), (6) вдоль изотерм, т. е.

$$\alpha = f(g(k, x)), \quad x = \frac{T - T_{\Gamma_{\text{РОСА-М}}}}{T_{\Gamma_{\text{ТФПК}}} - T_{\Gamma_{\text{РОСА-М}}}}$$

Предварительные расчеты показали, что при фиксированном значении коэффициента k в некоторых областях нарушается монотонность производных ТДФ. Для устранения этого недостатка параметр k взят в виде функции от аргумента x следующего вида:

$$k = a_0(\delta) + a_1(\delta)x + a_2(\delta)x^2.$$

Коэффициенты a_i сами являются функциями относительного сжатия δ следующего вида:

$$a_i(\delta) = a_{i1} + a_{i2} \exp(-a_{i3}\delta^{a_{i4}}), \quad i = 0, 1, 2.$$

Таким образом, зависимость для параметра k содержит 12 подгоночных параметров, которые подбираются из условия минимальной кривизны ТДФ в переходной области. При подборе коэффициентов также отслеживается монотонность производных ТДФ и выполнение термодинамических неравенств

$$c_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\rho > 0; \quad c_P - c_V > 0; \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_S > \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T > 0.$$

Для иллюстрации поведения ТДФ и их производных в переходной области и вблизи нее проведена серия расчетов по разработанному УРСу алюминия.

На рис. 5–9 показано поведение зависимостей давления, энергии, их производных и энтропии от температуры вдоль изохор. На рис. 10 представлены в координатах *давление — плотность* резуль-

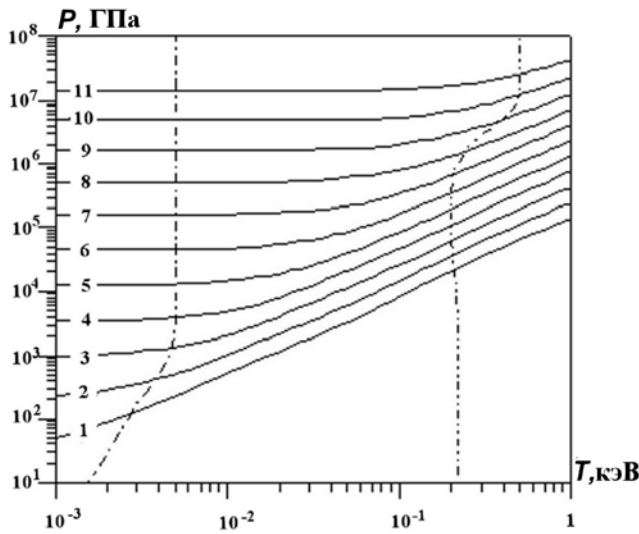


Рис. 5. Зависимость давления от температуры вдоль изохор: — — расчет по широкодиапазонному УРСу; 1 — $\delta = 0,56$; 2 — $\delta = 1$; 3 — $\delta = 1,8$; 4 — $\delta = 3,2$; 5 — $\delta = 5,6$; 6 — $\delta = 10$; 7 — $\delta = 18$; 8 — $\delta = 32$; 9 — $\delta = 56$; 10 — $\delta = 100$; 11 — $\delta = 280$; - - - нижняя граница области сшивки; - · - · - верхняя граница области сшивки

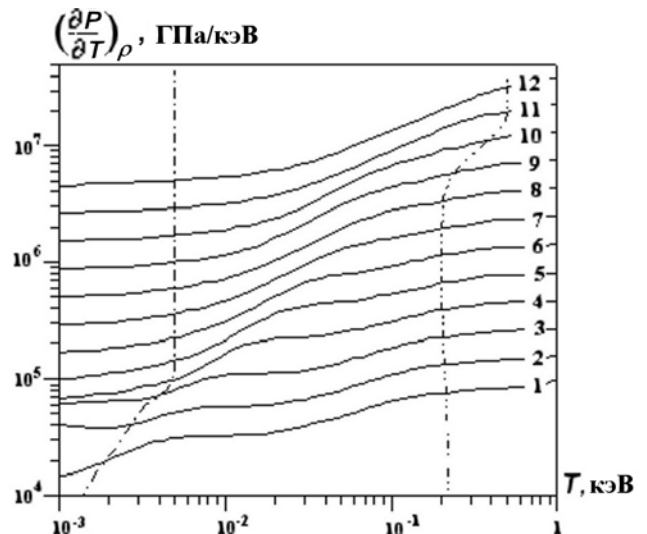


Рис. 6. Зависимость производной $\left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho$ от температуры вдоль изохор: — — расчет по широкодиапазонному УРСу; 1 — $\delta = 0,56$; 2 — $\delta = 1$; 3 — $\delta = 1,8$; 4 — $\delta = 3,2$; 5 — $\delta = 5,6$; 6 — $\delta = 10$; 7 — $\delta = 18$; 8 — $\delta = 32$; 9 — $\delta = 56$; 10 — $\delta = 100$; 11 — $\delta = 280$; 12 — $\delta = 320$; - - - нижняя граница области сшивки; - · - · - верхняя граница области сшивки

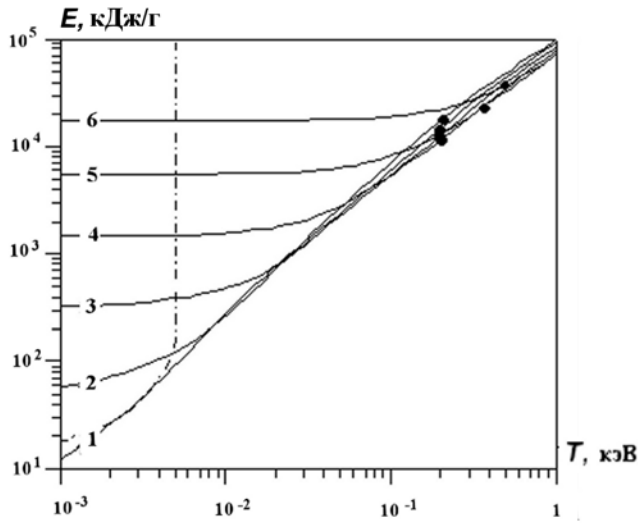


Рис. 7. Зависимость энергии от температуры вдоль изохор: — — расчет по широкодиапазонному УРСу; 1 — $\delta = 1$; 2 — $\delta = 3,2$; 3 — $\delta = 10$; 4 — $\delta = 32$; 5 — $\delta = 100$; 6 — $\delta = 320$; - - - - нижняя граница области сшивки; • — точки сшивки на верхней границе

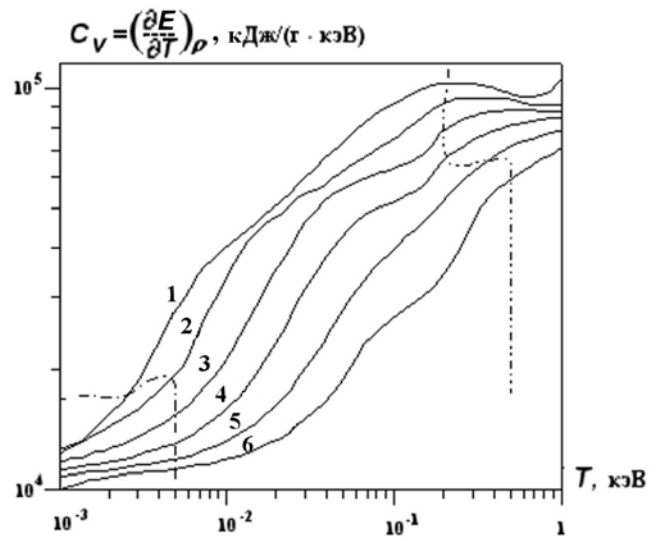


Рис. 8. Зависимость производной $\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_\rho$ от температуры вдоль изохор: — — расчет по широкодиапазонному УРСу; 1 — $\delta = 1$; 2 — $\delta = 3,2$; 3 — $\delta = 10$; 4 — $\delta = 32$; 5 — $\delta = 100$; 6 — $\delta = 320$; - - - - нижняя граница области сшивки; - · - · - - верхняя граница области сшивки

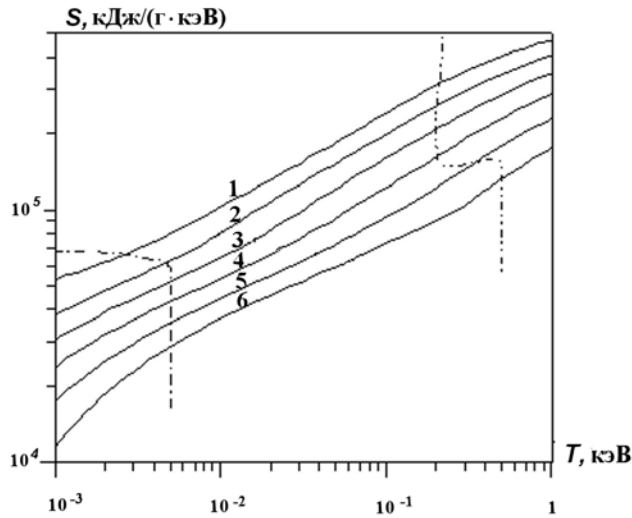


Рис. 9. Зависимость энтропии от температуры вдоль изохор: — — расчет по широкодиапазонному УРСу; 1 — $\delta = 1$; 2 — $\delta = 3,2$; 3 — $\delta = 10$; 4 — $\delta = 32$; 5 — $\delta = 100$; 6 — $\delta = 320$; - - - - нижняя граница области сшивки; - · - · - - верхняя граница области сшивки

таты расчета ударных адиабат сплошного и пористого алюминия по широкодиапазонному УРСу, по каждому из исходных УРСов и экспериментальные данные [14–16]. На рисунках показано также положение границ переходной области.

Представленные на рис. 5–10 результаты расчетов демонстрируют возможность построения термодинамически согласованных широкодиапазонных УРСов с использованием описанной методики.

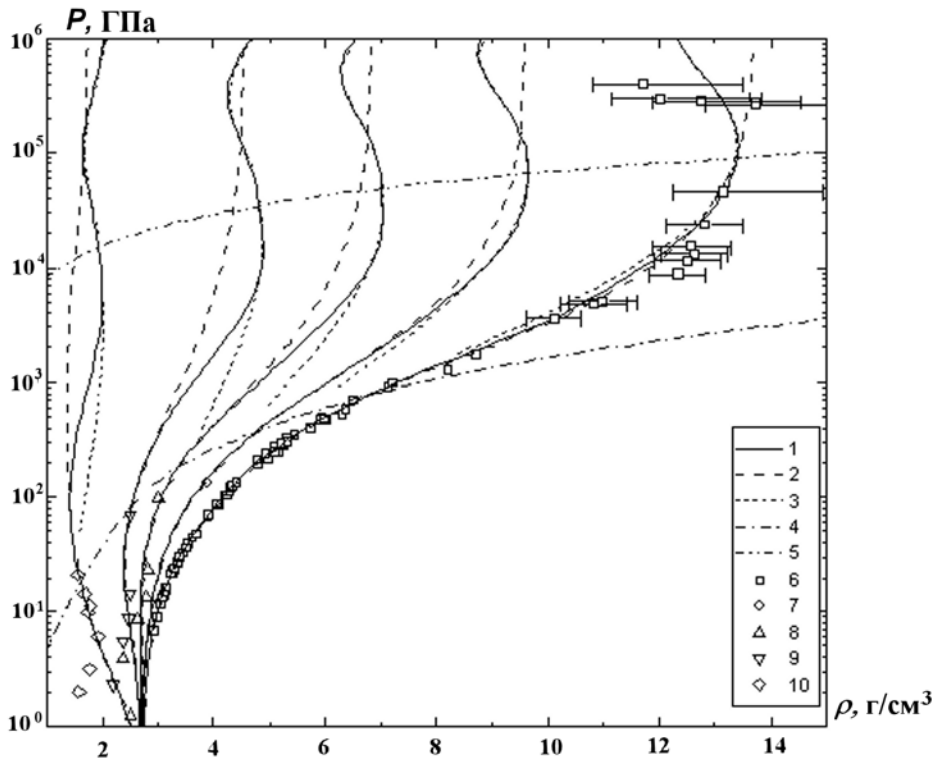


Рис. 10. Ударные адиабаты образцов пористого алюминия: 1–3 — расчеты по УРСам: 1 — широкодиапазонному; 2 — РОСА-М [11]; 3 — ТФПК [12, 13]; 4, 5 — границы переходной области; 6–10 — эксперименты [14–16]: 6 — $\rho_{00} \approx 2,71 \text{ г/см}^3$; 7 — $\rho_{00} \approx 1,9 \text{ г/см}^3$; 8 — $\rho_{00} \approx 1,35 \text{ г/см}^3$; 9 — $\rho_{00} \approx 0,9 \text{ г/см}^3$; 10 — $\rho_{00} \approx 0,34 \text{ г/см}^3$

Список литературы

1. *Калиткин Н. Н.* Модели вещества в экстремальном состоянии // Математическое моделирование. Физико-химические свойства вещества. М.: Наука, 1989. С. 114–161.
2. *Коваленко Г. В., Сапожников А. Т.* Табличное уравнение состояния воды // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1979. Вып. 4(6). С. 40–46.
3. *Trainor K. S.* Construction of wide-range tabular equation of state for copper // J. Appl. Phys. 1983. Vol. 54. P. 2372–2379.
4. *Сапожников А. Т., Герциук П. Д., Малышкина Е. Л., Миронова Е. Е., Шахова Л. Н.* Широкодиапазонное табличное уравнение состояния ГЛОБУС и его применение для описания термодинамических свойств меди // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1991. Вып. 1. С. 9–16.
5. *Сапожников А. Т., Коваленко Г. В., Герциук П. Д., Миронова Е. Е.* Широкодиапазонное табличное уравнение состояния воды // Там же. Вып. 2. С. 15–19.
6. *Гужев Д. С., Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В.* Построение глобальных уравнений состояния: Препринт № 3. М.: ИПМ АН СССР, 1991.

7. Барышева Н. М., Жеребцов В. А., Синько Г. В. САУРС — широкодиапазонное уравнение состояния с использованием сплайн-аппроксимации // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Методики и программы численного решения задач математической физики. 1988. Вып. 2. С. 80—86.
8. Гударенко Л. Ф., Куделькин В. Г. Построение широкодиапазонных уравнений состояния путем "сшивки" локальных уравнений с использованием модели смеси // Хим. физика. 2002. Т. 21, № 10. С. 11—18.
9. Kerley G. I. CTH Equation of State Package: Porosity and Reactive Burn Models. Sandia Report SAND92-0553, April 1992.
10. Тишин А. П., Шинкин Г. П. Полиномиальные сплайны со смешением // Журнал вычисл. мат. и мат. физ. 1991. Т. 31, № 11. С. 1745—1749.
11. Гордеев Д. Г., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Куделькин В. Г., Мочалов М. А. Полуэмпирическая модель уравнения состояния металлов РОСА-М. Уравнение состояния алюминия // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2005. Вып. 3. С. 24—36.
12. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт № 35. М.: ИПМ АН СССР, 1975.
13. Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества: Препринт № 59. М.: ИПМ АН СССР, 1978.
14. Трунин Р. Ф., Гударенко Л. Ф., Жерноклетов М. В., Симаков Г. В. Экспериментальные данные по ударно-волновому сжатию и адиабатическому расширению конденсированных веществ. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2001.
15. Аврорин Е. Н., Водолага Б. К., Волошин Н. П., Куропатенко В. Ф., Коваленко Г. В., Симоненко В. А., Черноволюк Б. Т. Экспериментальное подтверждение оболочечных эффектов на ударных адиабатах алюминия и свинца // Письма в ЖЭТФ. 1986. Т. 43. Вып. 5. С. 241—244.
16. Владимиров А. С., Волошин Н. П., Ногин В. Н., Петровцев А. В., Симоненко В. А. Ударная сжимаемость алюминия при давлениях $P > 1$ Гбар // Там же. 1984. Т. 39. Вып. 2. С. 69—72.

Статья поступила в редакцию 25.08.08.
