

УДК 519.6

## ПРОГРАММА DESSI "СШИВКИ" ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ФУНКЦИЙ И ПОСТРОЕНИЯ СПЛАЙН-УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ

Г. М. Елисеев, Д. С. Кондратьев  
(РФЯЦ-ВНИИЭФ)

Представлены формулы построения сглаживающих гиперболических сплайнов и бисплайнов третьего порядка, которые применены для гладкой "сшивки" термодинамических функций уравнений состояния. Кратко описана программа DESSI построения сплайн-уравнений состояния с помощью полиномиальных сплайнов различных типов.

Получена упрощенная по сравнению с классической формула термодинамической согласованности. С ее помощью реализованы два алгоритма термодинамически-согласованной интерполяции термодинамических функций сплайн-уравнений состояния. Кратко описаны три варианта построения сплайн-уравнений состояния. На основе таблиц термодинамических функций, рассчитанных по программе ПЛАЗМА-4, и уравнения состояния Г. Е. Клинишова с помощью сшивки гиперболических бисплайнов построено "пробное" сплайн-уравнение состояния меди.

### Введение

Система уравнений газовой динамики замыкается уравнениями состояния (УРСами), поэтому создание УРСов для нужд математического моделирования течений сплошной среды является актуальной задачей. УРС — это зависимость некоторых двух термодинамических функций (ТДФ) от двух других, например давления  $P$  и внутренней энергии  $E$  (далее энергия) от температуры  $T$  и плотности  $\rho$ . Исходные данные для построения УРСа вычисляются обычно по достаточно сложным моделям и получаются в виде таблиц. Поэтому необходима качественная аппроксимация таблиц, допускающая расчет всех необходимых ТДФ. Обычно требуются широкодиапазонные УРСы, когда аргументы изменяются на пять—семь порядков.

Авторы располагают программой ПЛАЗМА-4 [1], любезно предоставленной Н. Н. Калиткиным, с помощью которой можно сосчитать таблицы ТДФ в модели ионизационного равновесия (обобщение известных уравнений Саха). В областях плоскости *температура — плотность*, где вещество не является плазмой, эти таблицы дополняются авторами с помощью УРСа, построенного Г. Е. Клинишовым [2] на основе модели Томаса—Ферми с квантовыми поправками (см. также [3], где есть другие необходимые ссылки) и экспериментальных данных.

При построении широкодиапазонного УРСа надо, во-первых, гладко "сшить" табличные данные, сосчитанные по разным моделям, и, во-вторых, построить аппроксимацию объединенных таблиц. "Сшивка" данных выполняется авторами с помощью сглаживающих бигиперболических сплайнов третьего порядка ([4] и разд. 1 настоящей работы). Для этого разработана, написана и отлажена на алгоритмическом языке Паскаль в среде программирования Delphi 6 [4] программа DESSI (аббревиатура от слова Delphi и словосочетаний Equation of State, Spline Interpolation). Аппроксимация объединенных таблиц ТДФ делается с помощью полиномиальных бисплайнов третьего порядка [2] или одномерных кубических сплайнов [5]. В DESSI генерируется текст программы сплайн-УРСа на Фортране. Расчет всех необходимых ТДФ стандартизован и делается в сплайн-УРСах. Таким образом, процедура получения сплайн-УРСов веществ для программ газовой динамики полностью автоматизирована.

Обсуждаются алгоритмы построения термодинамически-согласованных сплайн-УРСов [6].

## 1. Сглаживающие сплайны

Определение, функциональный вид и свойства классических интерполяционных кубических и гиперболических сплайнов предполагаются известными [7–9]. В опубликованной литературе, насколько известно авторам, сглаживающие гиперболические сплайны не рассматривались. Таким образом, большая часть данного раздела является новой. Выведем для сглаживающих гиперболических сплайнов необходимые соотношения.

Пусть на интервале  $[x_0, x_n]$  определена функция  $y = f(x)$  и задана сетка

$$\pi : x_0 < x_1 < \dots < x_n. \quad (1)$$

Дана еще одна сетка узлов  $\Pi$  с двойной нумерацией:

$$\Pi : x_{ij} \in [x_{i-1}, x_i], \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, n_i, \quad \sum_{i=1}^n n_i = N. \quad (2)$$

На сетке  $\pi$  будет строиться сплайн, а в узлах сетки  $\Pi$  задана таблица значений функции  $y_{ij} = f(x_{ij})$ , т. е. будем рассматривать переопределенную задачу сглаживания по Лагранжу ( $n \leq N$ ). Используем понятие  $L$ -сплайна (см., например, [7], где он называется обобщенным сплайном).  $L$ -сплайн третьего порядка на каждом интервале  $\pi_i = [x_{i-1}, x_i]$  является решением обыкновенного дифференциального уравнения четвертого порядка

$$L_{4i}V(x) = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n). \quad (3)$$

Далее используем частный случай задания оператора  $L_{4i}$  вида

$$L_{4i} = D^2 (D^2 - \gamma_i^2) \quad (i = 1, 2, \dots, n), \quad (4)$$

где  $D = \frac{d}{dx}$ . Коэффициенты  $\gamma_i$  будем считать на каждом интервале  $\pi_i$  константами. Фундаментальная система  $V_{ij}(x)$  решений (4)

$$1, x, \exp(-\gamma_i x), \exp(+\gamma_i x) \quad (i = 1, 2, \dots, n) \quad (5)$$

позволяет записать сплайн в виде

$$S_3(x) = \sum_{j=0}^3 \alpha_{ij} V_{ij}(x) \quad (6)$$

или в виде

$$S_3(x) = M_{i-1} \Psi_{1i}(x_i - x) + M_i \Psi_{2i}(x_i - x) + l_{i-1} \Psi_{3i}(x_i - x) + l_i \Psi_{4i}(x_i - x), \quad (7)$$

где

$$\alpha_{ij}, l_i = S_3(x_i); \quad M_i = D^2 S_3(x_i) \quad (i = 1, 2, \dots, n; \quad j = 1, 2, 3, 4)$$

неизвестные коэффициенты сплайна. Функции

$$\Psi_{ji}(u) = a_{ji} \exp(\gamma_i u) + b_{ji} \exp(-\gamma_i u) + c_{ji} u + d_{ji}$$

являются линейными комбинациями функций (5).

Окончательные формулы будут несколько проще, если аргумент записать в виде разности  $u = x_i - x$ .

В (6)  $4n$  неизвестных коэффициентов сплайна  $\alpha_{ij}$  можно определить из системы  $4n$  уравнений, получаемых из условий интерполяции, непрерывности сплайна и его первых двух производных в узлах сетки  $\pi$  и с помощью краевых условий.

В (7) коэффициенты  $l_i$  и  $M_i$  — общие для двух соседних интервалов, поэтому запись сплайна в виде (7) автоматически обеспечивает непрерывность самого сплайна и его второй производной. Тем самым из системы уравнений для определения коэффициентов  $l_i$ ,  $M_i$  исключаются  $2(n-1)$  уравнений. Если говорить об интерполяционном сплайне, то по условиям интерполяции в узлах сетки  $\pi$  будет  $l_i = y_i$  и, следовательно, система максимально укоротится. В ней останется лишь  $n+1$  уравнение для определения  $M_i$ .

Таким образом, лучше использовать выражение сплайна (7), а не (6). Форму записи (7) можно назвать *представлением заданных величин*. В работе [9] предложен простой общий способ нахождения коэффициентов (7), который позднее был применен, например в [10], для построения полиномиальных эрмитовых сплайнов пятой и седьмой степеней.

При построении сглаживающего сплайна третьего порядка неизвестными будут коэффициенты  $l_i$  и  $M_i$ . Выражение для классического гиперболического сплайна имеет вид (см. [8] или [9])

$$S_h(x) = \frac{M_{i-1}}{\gamma_i^2} \frac{\text{sh}(\gamma_i(x_i - x))}{\text{sh}(\gamma_i h_i)} + \frac{M_i}{\gamma_i^2} \frac{\text{sh}(\gamma_i(x - x_{i-1}))}{\text{sh}(\gamma_i h_i)} + \left(l_{i-1} - \frac{M_{i-1}}{\gamma_i^2}\right) \frac{x_i - x}{h_i} + \left(l_i - \frac{M_i}{\gamma_i^2}\right) \frac{x - x_{i-1}}{h_i}.$$

Рассматривая уравнение (3) с оператором (4), можно установить известные асимптотические свойства гиперболических сплайнов. Если некоторое  $\gamma_i$  устремить к бесконечности, то гиперболический сплайн превращается в линейный сплайн. Если  $\gamma_i$  устремить к нулю, то гиперболический сплайн превращается в полиномиальный кубический сплайн. Таким образом, варьируя значения одного параметра  $\gamma_i$ , можно управлять кривизной сплайна на  $\pi_i$ .

Приравнявая в каждой внутренней точке  $x_i$  ( $i = 1, \dots, n-1$ ) сетки  $\pi$  значения первой производной слева и справа и прибавляя уравнения от краевых условий, например, в простейшем виде  $M_j = f''(x_j)$  ( $j = 0, n$ ), получаем известную систему уравнений [8] для определения коэффициентов  $M_i$  в виде

$$\begin{aligned} \frac{M_{i-1}}{\gamma_i^2} \left( \frac{1}{h_i} - \frac{\gamma_i}{\text{sh}(\gamma_i h_i)} \right) + M_i \left( \frac{\text{cth}(\gamma_i h_i)}{\gamma_i} - \frac{1}{\gamma_i^2 h_i} + \frac{\text{cth}(\gamma_{i+1} h_{i+1})}{\gamma_{i+1}} - \frac{1}{\gamma_{i+1}^2 h_{i+1}} \right) + \\ + \frac{M_{i-1}}{\gamma_{i+1}^2} \left( \frac{1}{h_{i+1}} - \frac{\gamma_{i+1}}{\text{sh}(\gamma_{i+1} h_{i+1})} \right) = \frac{y_{i-1}}{h_{i-1}} - y_i \frac{h_i + h_{i+1}}{h_i h_{i+1}} + \frac{y_{i+1}}{h_{i+1}} \quad (i = 1, 2, \dots, n-1). \end{aligned} \quad (8)$$

Займемся теперь задачей сглаживания. Уравнения для определения коэффициентов  $l_i$  сплайна (7) получим из условий минимума квадратичного функционала

$$\Phi(l_0, \dots, l_n, M_0, \dots, M_n) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^{n_i} W_{ij} (S_h(x_{ij}) - y_{ij})^2. \quad (9)$$

Приравняв производные (9) по  $l_i$  нулю, получим систему  $n+1$  уравнений:

$$\begin{aligned} l_0 \sum_{j=1}^{n_i} W_{1j} \left( \frac{\delta_{1j}}{h_1} \right)^2 + l_1 \sum_{j=1}^{n_i} W_{1j} \frac{\delta_{1j} \Delta_{1j}}{h_1^2} = \\ = \sum_{j=1}^{n_i} W_{1j} y_{1j} \frac{\delta_{1j}}{h_1} - M_0 \sum_{j=1}^{n_i} W_{1j} \frac{\delta_{1j}}{h_1} \Psi_{1j}(\delta_{1j}) - M_1 \sum_{j=1}^{n_i} W_{1j} \frac{\delta_{1j}}{h_1} \Psi_{2j}(\Delta_{1j}); \\ l_{k-1} \sum_{j=1}^{n_k} W_{kj} \frac{\delta_{kj} \Delta_{kj}}{h_k^2} + l_k \left[ \sum_{j=1}^{n_k} W_{kj} \left( \frac{\Delta_{kj}}{h_k} \right)^2 + \sum_{j=1}^{n_{k+1}} W_{k+1,j} \left( \frac{\delta_{k+1,j}}{h_{k+1}} \right)^2 \right] + l_{k+1} \sum_{j=1}^{n_{k+1}} W_{k+1,j} \frac{\delta_{k+1,j} \Delta_{k+1,j}}{h_{k+1}^2} = \\ = \sum_{j=1}^{n_k} W_{kj} y_{kj} \frac{\Delta_{kj}}{h_k} + \sum_{j=1}^{n_{k+1}} W_{k+1,j} y_{k+1,j} \frac{\delta_{k+1,j}}{h_{k+1}} - M_{k-1} \sum_{j=1}^{n_k} W_{kj} \frac{\Delta_{kj}}{h_k} \Psi_{1k}(\delta_{kj}) - \end{aligned}$$

$$-M_k \left[ \sum_{j=1}^{n_k} W_{kj} \Psi_{2k}(\Delta_{kj}) \frac{\Delta_{kj}}{h_k} + \sum_{j=1}^{n_{k+1}} W_{k+1j} \frac{\delta_{k+1j}}{h_{k+1}} \Psi_{1k+1}(\delta_{k+1j}) \right] - M_{k+1} \sum_{j=1}^{n_{k+1}} W_{k+1j} \frac{\delta_{k+1j}}{h_{k+1}} \Psi_{2k+1}(\Delta_{kj})$$

$$(k = 1, 2, \dots, n-1); \quad (10)$$

$$l_{n-1} \sum_{j=1}^{n_n} W_{nj} \frac{\delta_{nj} \Delta_{nj}}{h_n^2} + l_n \sum_{j=1}^{n_n} W_{nj} \left( \frac{\Delta_{nj}}{h_n} \right)^2 =$$

$$= \sum_{j=1}^{n_n} W_{nj} y_{nj} \frac{\Delta_{nj}}{h_n} - M_{n-1} \sum_{j=1}^{n_n} W_{nj} \Psi_{1n}(\delta_{nj}) \frac{\Delta_{nj}}{h_n} - M_n \sum_{j=1}^{n_n} W_{nj} \Psi_{2n}(\Delta_{nj}) \frac{\Delta_{nj}}{h_n},$$

где  $W_{ij}$  — веса значений  $y_{ij}$  и

$$\delta_{ij} = \delta_i(x_{ij}) = x_i - x_{ij}; \quad \Delta_{ij} = \Delta_i(x_{ij}) = x_{ij} - x_{i-1} \quad (i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 1, 2, \dots, n_i).$$

Можно предложить двухшаговую итерационную процедуру нахождения неизвестных  $l_i$ ,  $M_i$  из системы уравнений (10) и (8), в которой  $y_i$  надо заменить на  $l_i$ . Зададим на первом шаге нулевой итерации коэффициенты  $l_i^{(0)}$ . Имея  $l_i^{(0)}$ , на втором шаге нулевой итерации строим интерполяционный сплайн (из системы (8) находим  $M_i^{(0)}$ ). На первом шаге первой итерации из системы (10) находим все  $l_i^{(1)}$  (справа подставляем  $M_i^{(0)}$ ). Затем, на втором шаге первой итерации, решаем задачу интерполяции и находим  $M_i^{(1)}$ . И так далее до сходимости.

Требуется построить сглаживающие сплайны двух аргументов. В двумерном случае начальные данные задаются на прямоугольной сетке узлов сплайна  $\pi$ . На оси  $OX$  сетки те же самые, что и в одномерном случае, — (1) и (2), а на оси  $OY$  узлы таковы:

$$\pi : y_0 < y_1 < y_2 \dots < y_m$$

и соответственно

$$\Pi : y_{kl} \in [y_{l-1}, y_l], \quad l = 1, 2, \dots, m_k, \quad k = 1, 2, \dots, m, \quad \sum_{k=1}^m m_k = M.$$

Значения параметра  $\gamma$  задаются в двумерном случае в виде матрицы  $\gamma_{ik}$ . Зашумленные значения функции  $Z_{ijkl} = f(x_{ij}, y_{kl})$  и коэффициенты сплайна — теперь тоже соответствующие матрицы.

Классический алгоритм [7] построения двумерного интерполяционного сплайна (без использования данных на сетке  $\Pi$ ) представляет собой нахождение тензорного произведения одномерных сплайнов и разбивается на четыре этапа. В данном случае интерес представляет лишь таблица сглаженных значений функции, поэтому алгоритм можно упростить. На первом этапе на линиях  $x = x_{ij}$  строим гиперболические сглаживающие одномерные сплайны. На втором этапе по этим частично сглаженным значениям снова строим одномерные сглаживающие сплайны на всех линиях  $y = y_{kl}$ . Вычисляется таблица сглаженных значений  $Z_{ijkl}$ , которая пересылается на хранение для дальнейшего использования, а таблиц коэффициентов — частных производных — не требуется.

## 2. Программа DESSI

Обычно построение УРСов требует много времени и "ручного" труда. Чтобы ускорить и облегчить этот процесс, на алгоритмическом языке Паскаль в среде программирования Delphi 6 [4] написана программа DESSI [5], в которой содержится 250 процедур ( $\sim 9\,000$  строк). С ее помощью автоматизированы процедуры задания и обработки начальных данных и генерации текстов программ сплайн-УРСов на Фортране. В программе DESSI реализованы алгоритмы построения лагранжевых и эрмитовых интерполяционных полиномиальных сплайнов третьей, четвертой и пятой степеней одного и двух аргументов. Для подготовки данных и проведения расчетов в интерактивном режиме созданы удобные формы и визуализатор.

Комплекс состоит из трех частей: собственно DESSI, DESSI-R и DESSI-SA. Во второй и третьей программах имеется по 30 процедур ( $\sim 1300$  и  $\sim 1700$  строк соответственно).

В программе DESSI-R реализована возможность замены переменных и обращения функций. С ее помощью по исходным таблицам давления и энергии в плоскости переменных *температура — плотность* можно построить сплайн-УРС в той же плоскости и, кроме того, в плоскости *энергия — плотность*. То есть в программе DESSI-R, помимо некоторых "стандартных" действий, выполняется замена переменной в давлении (температура заменяется энергией), происходит обращение зависимости энергии от температуры.

С помощью программы DESSI-SA можно выполнить сглаживание (smooth) и сшивку (agglutination) ТДФ в соответствии с алгоритмом, описанным в предыдущем разделе. Фактически программа DESSI-SA предназначена для подготовки начальных данных для DESSI и DESSI-R.

Не будем здесь описывать программы более подробно. В качестве иллюстрации интерфейса программы DESSI-SA приведем на рис. 1 без комментариев только одну из основных форм, которая предназначена для визуализации и сшивки данных в интерактивном режиме. На рисунке показан график теплоемкости, поэтому далее пояснения будем делать на примере этой функции. Они будут справедливы при аппроксимации как давления, так и энергии.

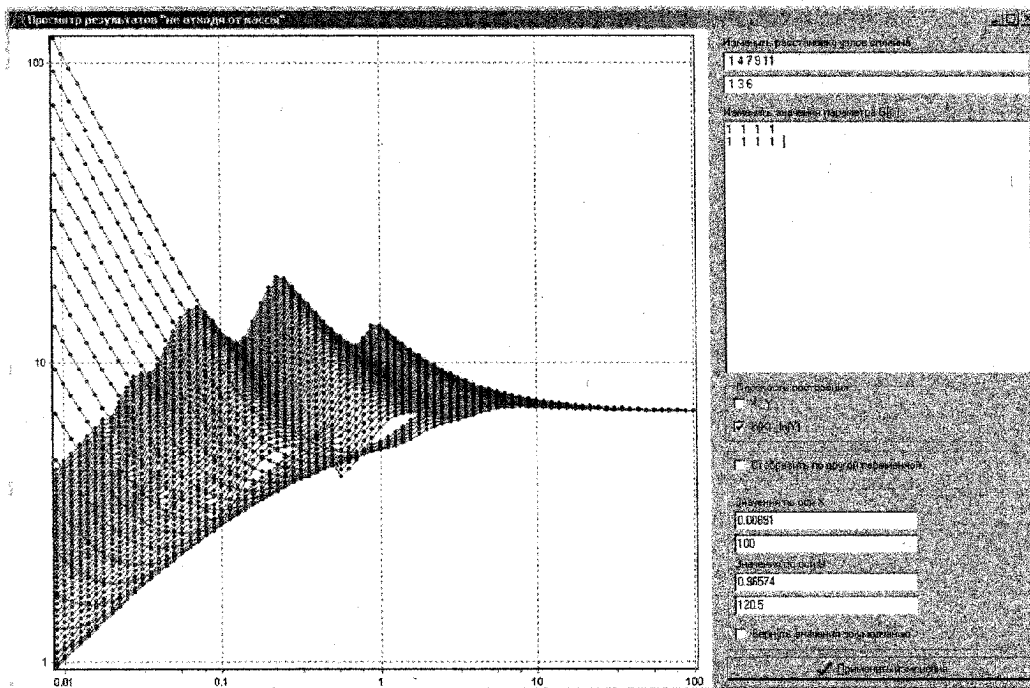


Рис. 1. Форма DESSI-SA для визуализации данных и работы в интерактивном режиме

### 3. Сшивка ТДФ

Границы применимости какой-либо физической модели расчета ТДФ обычно можно определить, если появляется новая, более точная модель. Границы применимости этой новой модели снова невозможно указать достаточно точно. Авторы хотят сказать, что вопрос о границах применимости моделей изначально имеет нечеткий ответ. Поэтому при постановке задачи о сшивке ТДФ желательно разрабатывать алгоритмы, которые были бы слабо чувствительны к установлению границ применимости моделей УРСов.

В работе [11] обсуждается построение УРСа меди с помощью сшивки данных, сосчитанных по семи разным моделям. Области применимости различных моделей фактически "волевым" образом ограничены отрезками прямых так, что на каждой границе сшиваются данные только по двум

моделям. В статье [11] алгоритм сшивки не детализируется, говорится только, что сшивка выполняется с помощью "гладкой численной интерполяции", и приводятся примеры графиков сопряжения изотерм и изохор.

В работе [12] сшивка давления и энергии, заданных в непересекающихся областях 1 и 2, выполняется на основе соотношения для двухкомпонентной смеси веществ

$$F_{\text{смеси}}(\rho, T) = \alpha F_1(\rho, T) + (1 - \alpha) F_2(\rho, T),$$

где  $F$  — это либо давление  $P$ , либо энергия  $E$ . Функция  $\alpha$  — "концентрация одного из компонентов". Значение  $\alpha$  равно единице в одной из областей и нулю в другой. Сшивка ТДФ выполняется в результате подбора параметра  $\alpha$  в промежутке между областями. Функция  $\alpha$  достаточно сложно зависит от температуры и плотности (см. подробнее [12]). Другим недостатком такого способа сшивки является необходимость точно указать границы подобластей, в которых определены функции  $F_1$  и  $F_2$ .

В данной работе для сшивки ТДФ применяются двумерные сглаживающие гиперболические сплайны третьего порядка. По сравнению с подходами в [11] и [12] предлагаемый способ более "однозначен" и прост. Формой приближающей кривой можно управлять с помощью только одного параметра.

В качестве примера рассмотрим сшивку десяти нижних изохор теплоемкости на разрыве, который виден на рис. 1 между двумя линзовидными белыми пятнами. Результаты сшивки представлены на рис. 2. Гиперболический сглаживающий бисплайн строился в отдельности для трех, пяти и двух изохор, считая сверху вниз. Эти изохоры изображены на рис. 2 разными линиями. На рисунке по оси абсцисс отложена не температура, как на рис. 1, а номера узлов сетки  $N$ . Разрыв находится в 36-м узле. Элементы матрицы значений параметра  $\gamma$  задавались числами от 1 до 80. Сплайны строились на сетках из 3—5 узлов по обоим переменным. Веса всех узлов равны единице.

Как видим, результаты сшивки вполне удовлетворительные. Эти результаты слабо изменятся, если установить разрыв не в 36-м, а в другом узле.

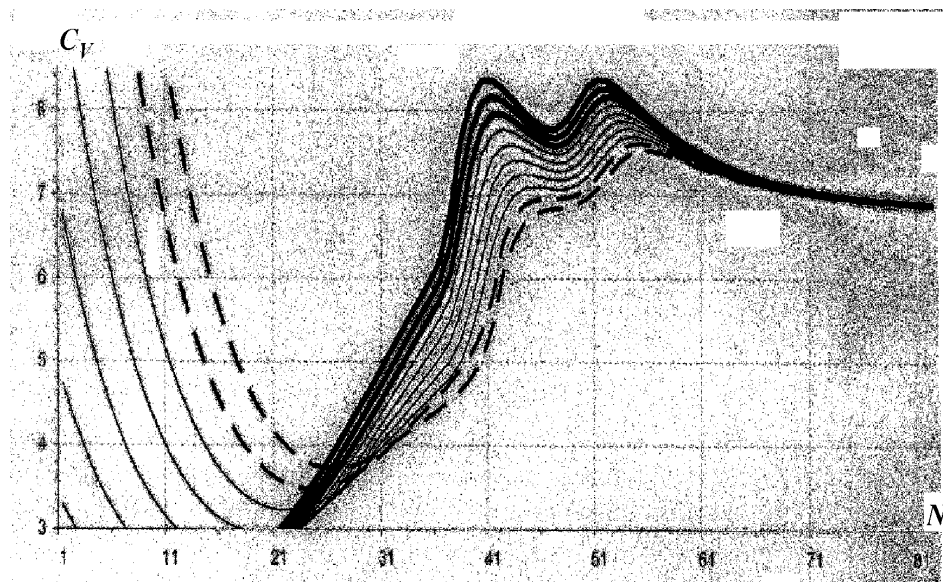


Рис. 2. Изохоры теплоемкости меди: — —  $\rho = 31,6; 39,81; 50,12$  г/см<sup>3</sup>; — — — —  $\rho = 63,1; 79,43; 100; 125,9; 158,5$  г/см<sup>3</sup>; — — — — —  $\rho = 199,5; 251,2$  г/см<sup>3</sup>

#### 4. О термодинамической согласованности

Рассмотрим ТДФ УРСа в плоскости переменных *температура — плотность*  $(T, \rho)$  или *температура — удельный объем*  $(T, V)$ . Давление и энергия не являются независимыми функциями. Они связаны известным уравнением термодинамической согласованности, которое имеет вид

$$T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = P + \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_T. \quad (11)$$

В статье [6] формула (11) была существенно упрощена. Введем логарифмические переменные  $\ln T$  и  $\ln V$  и сделаем замену функций УРСа:

$$C_V(\ln T, \ln V) = \frac{E}{T}; \quad G(\ln T, \ln V) = \frac{P}{\rho T}. \quad (12)$$

Можно проверить, что тогда формула (11) примет следующий, более простой вид:

$$\left( \frac{\partial G}{\partial \ln T} \right)_{\ln V} = \left( \frac{\partial C_V}{\partial \ln V} \right)_{\ln T} \quad \text{или} \quad \left( \frac{\partial G}{\partial \ln T} \right)_{\ln \rho} = - \left( \frac{\partial C_V}{\partial \ln \rho} \right)_{\ln T}. \quad (13)$$

Уравнение (11) или (13) можно использовать для контроля качества УРСа, а можно применить непосредственно для его построения.

#### 5. О построении сплайн-УРСа

При построении сплайн-УРСа удобнее аппроксимировать таблицы не функций  $E$  и  $P$ , а  $C_V$  и  $G$ . Для них условие (13) имеет наипростейший вид. Эти функции изменяются в существенно меньшем диапазоне значений. Поэтому в программе DESSI-SA с ними легче работать в интерактивном режиме.

Сплайн-аппроксимацию таблиц  $C_V$  и  $G$  можно выполнить многими способами (см., например, [6]). Авторы реализовали и использовали на практике три подхода. Сделаем сначала замечания, общие для всех этих подходов.

Экстремумы теплоемкости с ростом плотности сдвигаются вправо (см. рис. 1). Поэтому при построении бисплайна приходится брать слишком частые опорные сетки.

Разобьем прямоугольник определения ТДФ по температуре на меньшие прямоугольники так, чтобы в каждом был лишь один максимум  $C_V$ . В каждом из прямоугольников построим бисплайн. Тогда сетки в каждом из них будут редкими (1–3 узла на порядок по каждой из переменных). Как оказалось, для функции  $G$  годится то же самое разбиение на частичные прямоугольники.

Краевые условия (производные на границах) при построении сплайнов вычисляем по конечным разностям. Расчет ТДФ в промежутках между прямоугольниками выполняем с помощью классических эрмитовых сплайнов.

Теперь остановимся подробнее на каждом из реализованных подходов.

*Способ 1.* Первый и простейший подход к построению сплайн-УРСа состоит в том, что бисплайны строятся без использования условия (11) или (13) так, чтобы точность аппроксимации ТДФ (12) составляла примерно 0,5%. Такой сплайн-УРС получается термодинамически рассогласованным.

*Способ 2.* Изохоры  $C_V$  осциллируют, но изотермы — плавные кривые. Пусть построена сплайн-аппроксимация  $S_G(\ln T, \ln \rho)$  функции  $G$ . Тогда, интегрируя в (13), можно вычислить значения  $C_V$  по формуле

$$C_V(\ln T, \ln \rho) = - \int \frac{\partial S_G(\ln T, \ln \rho)}{\partial \ln T} d \ln \rho + S_{C_V}(\ln T), \quad (14)$$

где  $S_{C_V}(\ln T)$  — произвольная постоянная неопределенного интеграла, вычисляемая по сплайн-аппроксимации таблицы  $C_V(\ln T, \ln \rho_0)$ . Для применения формулы (14) надо получить предварительно формулы шивки первообразной сплайна. Можно, конечно, проинтегрировать формулу (13) по  $\ln T$ , но тогда сетка сплайна будет иметь несколько больше узлов.

*Способ 3.* При построении сплайн-УРСа можно использовать только кубические сплайны одной переменной. Построим аппроксимацию  $C_V$  и  $G$  на изотермах кубическими сплайнами по логарифму плотности. По логарифму температуры функцию  $C_V$  будем интерполировать линейно. Для функции  $G$  порядок аппроксимации можно повысить. Вычислим производную  $G$  по  $\ln T$  с помощью соотношения (13). Это позволяет применить для интерполяции  $G$  по  $\ln T$  классический эрмитов сплайн третьей степени. Очевидно, что при таком подходе условие термодинамической согласованности удовлетворяется автоматически.

Аналогичным образом можно построить сплайн-УРС в плоскости переменных *плотность — энергия* или других плоскостях.

Авторами были сосчитаны таблицы ТДФ по программе ПЛАЗМА-4 и УРС Г. Е. Клинишова для меди. Как это описано выше, выполнена сшивка  $C_V$  и  $G$  с помощью программы DESSI-SA. Сплайн-УРС меди был построен на базе этих сшитых таблиц в рамках третьего подхода сплайн-аппроксимации. Первый и второй подходы были опробованы для некоторых других веществ на примере таблиц, сосчитанных только по одной модели — ПЛАЗМА-4. Более полное описание или сравнение качества полученных сплайн-УРСов и их возможного практического использования — тема отдельной статьи.

### Список литературы

1. *Калиткин Н. Н., Ритус И. В., Миронов А. М.* Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов: Препринт № 46. М.: ИПМ РАН им. М. В. Келдыша, 1983.
2. *Елисеев Г. М., Клинишов Г. Е.* Уравнение состояния твердых веществ и его сплайн-аппроксимация: Препринт № 173. М.: ИПМ АН СССР, 1982.
3. *Копышев В. П.* О термодинамике ядер одноатомного вещества: Препринт № 59. М.: ИПМ АН СССР, 1978.
4. *Архангельский А. Я.* Программирование в Delphi 6. М.: Бином, 2001.
5. *Кондратьев Д. С., Быковникова Н. В., Елисеев Г. М., Скидан С. Г.* Программа DESSI построения сплайн-уравнений состояния // Сб. докладов 3-й науч.-тех. конференции "Молодежь в науке". Саров, 2—4 ноября 2004 г. Саров: РФЯЦ-ВНИИЭФ, 2004. С. 83—86.
6. *Елисеев Г. М.* Термодинамическая согласованность и сплайн-уравнение состояния // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 1984. Вып. 1. С. 35—45.
7. *Алберг Дж., Нильсон Э., Уолли Дж.* Теория сплайнов и ее приложения. М.: Мир, 1972.
8. *Schweikert D. G.* An interpolation curve using a spline in tension // J. Math. Phys. 1966. Vol. 45. P. 312—317.
9. *Елисеев Г. М.* L-сплайны, порождаемые уравнениями с постоянными коэффициентами // Физическая механика неоднородных сред. Новосибирск, 1984. С. 146—153.
10. *Дегтяренко Н. Н., Елисеев Г. М., Жильникова Н. Н.* Сплайн-уравнение состояния продуктов химических реакций // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Теоретическая и прикладная физика. 2000. Вып. 1. С. 58—64.
11. *Trainor K. S.* Construction of a wide-range tabular equation of state for copper // J. Appl. Phys. 1983. Vol. 54, No 5. P. 2372—2379.
12. *Гударенко Л. Ф., Куделькин В. Г.* Построение широкодиапазонных уравнений состояния путем "сшивки" локальных уравнений с использованием модели смеси // Химическая физика. 2002. Т. 21, № 10. С. 11—18.