

УДК 536.71+519.68

КОМПЛЕКС ПРОГРАММ ТУР ДЛЯ ПОСТРОЕНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЯ УРАВНЕНИЙ СОСТОЯНИЯ

А. Т. Сапожников, Е. Е. Миронова
(РФЯЦ-ВНИИТФ)

Описываются структура и функциональные возможности комплекса программ ТУР, который предназначен для математического обеспечения построения и исследования уравнений состояния. Кратко излагаются алгоритмы, реализованные в программах комплекса.

Для решения практических задач механики и физики при высокой концентрации энергии требуются уравнения состояния (УРСы), разнообразные по диапазону применимости, точности, математической форме и экономичности расчетов на ЭВМ. В РФЯЦ-ВНИИТФ для построения и исследования УРСов создан комплекс программ ТУР. В создании комплекса в разное время принимали участие сотрудники ВНИИТФ А. Т. Сапожников (руководитель разработки), А. В. Першина, В. Д. Дедова, Г. В. Коваленко, Е. Е. Миронова, Е. Л. Малышкина, П. Д. Герщук, Л. Н. Шахова, Н. К. Голубева, Е. П. Вахрамеева, Л. В. Дякина, М. Е. Котегова, Т. Е. Еськова, Т. П. Ротко, И. В. Баландина, Ю. В. Кайгородцева, М. С. Смирнова, В. В. Дремов, Ф. А. Сапожников, Е. В. Пронина, А. Н. Краснов.

Комплекс ТУР состоит из четырех библиотек:

- 1) специализированных программ;
- 2) теоретических моделей термодинамических свойств веществ;
- 3) УРСов*;
- 4) наборов констант УРСов для конкретных веществ.

Библиотека специализированных программ

Специализированные программы первой библиотеки делятся по своему назначению на три вида. Это программы:

*Правильнее говорить о *программах* УРСов и теоретических моделей термодинамических свойств веществ. Однако иногда для краткости слово *программы* опускается.

- 1) для проведения термодинамических расчетов по УРСам;
- 2) элементарных газодинамических расчетов;
- 3) построения табличных и аналитических УРСов.

Программы термодинамических расчетов по УРСам.

Программа КРАВ-2. Предназначена для расчета давления, удельной внутренней энергии, теплоемкости, коэффициента объемного расширения, коэффициента Грюнайзена, скорости звука, энтропии, свободной энергии и термодинамического потенциала Гиббса вдоль изотерм, изохор, изобар и линий постоянной энергии.

Сетки, используемые этой программой, — равномерные, равномерно-логарифмические и в виде произвольного набора точек. Производные термодинамических функций (ТДФ) рассчитываются численно по простейшим разностным формулам, а встречающиеся интегралы вычисляются методом Симпсона по стандартной программе.

Программа КРАВ-2 необходима для оценки точности описания экспериментальных и теоретических данных.

Программа РКР-4. Предназначена для расчета критических параметров и параметров пара и жидкости при фазовом равновесии.

Параметры пара и жидкости рассчитываются на сетке по температуре. Сетка задается или выбирается автоматически из условия точности линейной интерполяции заданных термодинамических параметров, например, энергии по плотности и (или) давления по температуре.

Критические значения температуры, плотности и давления $T_{кр}$, $\rho_{кр}$, $P_{кр}$ определяются системой уравнений

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

Решение этой системы сводится к задаче определения минимума функции $f(\rho, T) = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T^2 + \left(\frac{\partial^2 P}{\partial \rho^2}\right)_T^2$. Минимум ищется симплекс-методом [1]. В данном случае симплекс представляет собой равносторонний треугольник в плоскости переменных ρ, T .

Кривая равновесия пара и жидкости вычисляется по правилу Максвелла, которое записывается с помощью уравнения

$$\int_{V_{ж}}^{V_{п}} (P(\rho, T) - P_p) dV = 0,$$

где P_p — равновесное давление; $V_{п}$, $V_{ж}$ — удельные объемы пара и жидкости при равновесии. Уравнение решается численно двойными итерациями по плотности и давлению с использованием стандартных программ вычисления интеграла по Симпсону и определения корня по модулю ZEROIN [2]. Попутно вычисляется спиноподаль — геометрическое место точек максимумов и минимумов давления на изотермах.

Результаты расчетов по программе необходимы для определения оптимальных значений констант аналитических УРСов и оценки точности описания экспериментальных данных при испарении.

Программа RFD-2. Предназначена для расчета термодинамических параметров при плавлении и полиморфных фазовых переходах.

Параметры фаз при равновесии рассчитываются на сетке по температуре или давлению, которая задается в информации к программе или выбирается автоматически из условия точности линейной интерполяции термодинамических параметров, например, давления по температуре.

Условия равновесия фаз имеют вид:

$$\begin{aligned} P_1 &= P_2 \text{ для механического равновесия;} \\ T_1 &= T_2 \text{ для теплового равновесия;} \\ E_1 - T_1 S_1 + P_1 V_1 &= E_2 - T_2 S_2 + P_2 V_2 \text{ для} \\ &\text{фазового равновесия.} \end{aligned}$$

Для замыкания системы уравнений к ней добавляются термическое и калорическое УРСы каждой фазы:

$$P = P_i(\rho_i, T); \quad E = E_i(\rho_i, T) + E_{0i},$$

а также зависимость энтропии каждой фазы от плотности и температуры

$$S = S_i(\rho_i, T) + S_{0i}.$$

Здесь i — номер фазы; E_{0i}, S_{0i} — аддитивные константы в энергии и энтропии. Энтропия вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} S &= \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{1}{T} \left(\left(\frac{\partial E_T}{\partial \rho} \right)_T - \frac{P_T}{\rho^2} \right) d\rho + \\ &+ \int_{T_0}^T \frac{1}{T} \left(\frac{\partial E_T}{\partial T} \right)_{\rho} dT + S_0 = \\ &= \frac{E_T(\rho, T)}{T} - \frac{E_T(\rho_0, T_0)}{T_0} + \int_{T_0}^T \frac{E_T(\rho, T)}{T^2} dT - \\ &- \frac{1}{T} \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{P_T(\rho, T)}{\rho^2} d\rho + S_0. \end{aligned}$$

Константы E_{0i} и S_{0i} в одной из фаз или известны, или могут быть заданы произвольно. Аддитивные константы для другой фазы находятся из условия, чтобы расчетная кривая равновесия $P(T)$ проходила через заданную точку (P_0, T_0) , а расчетная теплота фазового перехода при $T = T_0$ равнялась заданному значению Q_0 . Значения величин P_0, T_0, Q_0 берутся из экспериментальных данных.

В программе также реализован второй способ расчета кривой равновесия, который состоит в численном интегрировании уравнения Клапейрона—Клаузиуса

$$\frac{dP}{dT} = \frac{S_2 - S_1}{V_2 - V_1}.$$

Это уравнение с помощью условия фазового равновесия преобразуется к виду

$$\frac{dP}{dT} = \frac{P(V_2 - V_1) + E_2 - E_1}{T(V_2 - V_1)}.$$

При втором способе не требуется энтропии, и в этом заключается его преимущество.

Программа RFD-2 необходима для оценки точности описания экспериментальных данных

по плавлению или полиморфным фазовым переходам.

Программы RKR-4 и RFD-2 обеспечивают построение фазовых диаграмм и предоставляют необходимую информацию для построения УРСа равновесной смеси фаз, который имеет вид

$$P = P_p(T);$$

$$E = \frac{V - V_2(T)}{V_1(T) - V_2(T)} E_1(T) + \frac{V - V_1(T)}{V_2(T) - V_1(T)} E_2(T),$$

где $P = P_p(T)$ — кривая равновесия фаз; V_1, E_1 и V_2, E_2 — удельный объем и внутренняя энергия первой и второй фаз при равновесии.

Программы для элементарных газодинамических расчетов.

Программа UDAR. Предназначена для расчета параметров ударных волн (УВ) и центрированных волн разрежения.

Ударные адиабаты рассчитываются по калорическому и термическому УРСам на заданной сетке по температуре или давлению. Изэнтропы рассчитываются на заданной сетке по плотности. Сетки — равномерные или равномерно-логарифмические. Вдоль ударных адиабат рассчитываются термодинамические параметры: T — температура; ρ — плотность; δ — сжатие; P — давление; E — удельная внутренняя энергия; U — скорость вещества за фронтом УВ; D — скорость УВ; C — скорость звука в веществе; Γ — коэффициент Грюнайзена; P_{Π} — потенциальная составляющая давления; E_{Π} — потенциальная составляющая энергии.

При расчете ударной адиабаты решается система уравнений, которая состоит из уравнения ударной адиабаты

$$E - E_{00} = \frac{1}{2}(P + P_{00}) \left(\frac{1}{\rho_{00}} - \frac{1}{\rho} \right),$$

термического и калорического УРСов

$$P = P(\rho, T); \quad E = E(\rho, T),$$

где ρ — плотность; T — температура; P — давление; E — удельная внутренняя энергия; ρ_{00}, P_{00} и E_{00} — начальные значения плотности, давления и энергии. Точка $(\rho, P, E)_{00}$ может не принадлежать поверхности УРСа, например, из-за пористости.

Если задана сетка по температуре, то система уравнений Гюгонио сводится к одному нелинейному уравнению относительно плотности, корень которого ищется по стандартному модулю ZEROIN. Если задана сетка по давлению, то система уравнений Гюгонио решается с помощью двойных итераций: *внутренних* — по плотности и *внешних* — по температуре.

Вдоль изэнтропы, кроме термодинамических параметров, рассчитывается скорость разгрузки *вперед* и *назад* в центрированной волне разрежения. Расчет изэнтроп проводится двумя способами.

При первом способе численно решается уравнение

$$S(\rho, T) = S(\rho_0, T_0) = \text{const},$$

где S — энтропия; $(\rho, T)_0$ — заданная точка, через которую проходит изэнтропа. Энтропия вычисляется по формуле, приведенной в описании программы RFD-2.

Второй способ заключается в интегрировании системы дифференциальных уравнений, описывающих изэнтропический процесс:

$$\frac{dT}{d\rho} = \frac{1}{\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_{\rho}} \left(\frac{P}{\rho^2} - \left(\frac{\partial E}{\partial \rho}\right)_T \right);$$

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

Здесь U — скорость вещества.

Система уравнений решается по стандартному модулю методом Рунге—Кутты. Частные производные, входящие в формулы, вычисляются численно. Этот способ расчета изэнтроп более быстрый, но он пригоден лишь для непрерывных и достаточно гладких УРСов, так как в правые части уравнений входят производные УРСов. Первый способ действенен при любых УРСах, так как он не требует вычисления производных.

Программа UDAR необходима для оценки точности описания экспериментальных данных ударно-волновых опытов и для определения оптимальных значений констант аналитических УРСов.

Программа UDAR-FP. Предназначена для расчета параметров УВ, когда в веществе происходит равновесный фазовый переход.

В программе на основе кривой Гюгиони и фазовой диаграммы проводится анализ устойчивости УВ и в случае, если она неустойчива, рассчитываются параметры устойчивой двухволновой конфигурации.

Эта программа полезна для интерпретации экспериментальных данных по ударному сжатию твердых тел, а также для оценки точности многофазных УРСов.

Программа IZN-FP. Предназначена для расчета параметров центрированной волны разгрузки вещества, в котором происходит равновесный фазовый переход.

Расчет энтропии в пределах области стабильности каждой фазы и в равновесной смеси фаз выполняется так же, как в программе UDAR. Результаты расчета используются для интерпретации экспериментальных данных по энтропической разгрузке, а также для оценки точности многофазных УРСов.

Программы DISK и DISK-2. Используются для обработки экспериментальных данных по измерению сравнительной ударной сжимаемости методом прямого и обратного отражения.

В этих программах рассчитывается прохождение УВ через систему, состоящую из двух прилегающих друг к другу слоев веществ. УРС одного из веществ, принимаемого за эталон, предполагается известным. Второе вещество является исследуемым. В случае метода обратного отражения требуется УРС и для исследуемого вещества, но его влияние на окончательный результат мало.

Система уравнений Гюгиони при заданной скорости УВ решается итерациями. Расчет энтропии разгрузки проводится численным интегрированием системы обыкновенных дифференциальных уравнений по стандартному модулю, в котором реализован метод Рунге—Кутты.

Результатом выполнения программ являются параметры ударно-сжатого исследуемого вещества, а программа DISK выдает и их погрешности, которые определяются погрешностью измерения скорости УВ. Эта информация может использоваться для построения аналитических УРСов и оценки точности УРСов.

Программа JUGE. Предназначена для расчета газодинамических параметров в точке Жуге (за фронтом нормальной детонационной волны). В

программе реализованы два метода расчета параметров детонации.

В первом методе итерациями решается система уравнений сохранения массы, энергии и импульса на фронте детонационной волны. Проводятся два уровня итераций: внешние — по плотности и внутренние — по температуре.

Во втором методе плотность и температура в точке Жуге определяются как координаты точки минимума функции, которая равна сумме квадратов невязок в уравнениях сохранения. Минимум ищется с помощью модуля LOKMIN, который является модификацией программы ФЛЕКСИ [1]. Этот модуль предназначен для поиска локального минимума функции в ограниченной области методом деформируемого многогранника в сочетании с методом скользящего допуска.

В методе деформируемого многогранника используется многогранник в N -мерном пространстве аргументов функции с минимальным числом вершин, например, при двух искомым параметрах это треугольник, а при трех — тетраэдр и т. д. Функция вычисляется в вершинах многогранника, и на основе этих данных строится новый многогранник (перемещается, увеличиваясь или уменьшаясь). Если вершина "выпадает" за границу области поиска, то она выводится на ее границу тем же методом деформируемого многогранника, а функцией цели является расстояние данной вершины от границы. В этом заключается метод скользящего допуска.

Программа JUGE необходима для оценки точности УРСов продуктов взрыва.

Программы построения табличных и аналитических УРСов.

Программа PODCON. Предназначена для определения оптимальных значений констант аналитических УРСов.

Оптимальные значения констант находятся путем минимизации суммы квадратов отклонений численных значений ТДФ, рассчитанных по УРСам, от значений, полученных в эксперименте или рассчитанных по теоретическим моделям. В качестве задаваемой информации (экспериментальной или полученной по теоретическим моделям) могут быть точки ударных адиабат сплошного и пористого веществ, значения критических параметров и параметров при испарении, значения ТДФ на изолиниях, например, экспериментальные данные по теплоемкости и тепловому расширению при атмосферном

давлении. Минимум функции ищется с помощью модуля LOKMIN.

Программа PTSOST. Предназначена для расчета потенциальных составляющих давления и энергии по экспериментальной ударной адиабате и заданному коэффициенту Грюнайзена.

В этой программе ударная адиабата представляется линейным соотношением в переменных *скорость вещества — скорость УВ*: $D = C_0 + bU$, которое широко применяется для аппроксимации экспериментальных данных об ударной сжимаемости. Зависимость коэффициента Грюнайзена от плотности определяется по теоретическим моделям Ландау—Слейтера, Дугдайла—Макдональда или Зубарева—Ващенко [3]. В результате численного решения соответствующей системы дифференциальных уравнений получаются потенциальные составляющие давления и энергии, которые могут использоваться при построении аналитических и табличных УРСов.

Программа SSHVK. Предназначена для построения широкодиапазонных УРСов путем *сшивки* локальных УРСов.

Способ сшивки — интерполяционный, а именно строится оптимальная интерполирующая поверхность, которая представляется однопараметрическим семейством изохор или изотерм. Кривые, принадлежащие разным УРСам, *сшиваются* полиномом Эрмита третьей степени. Местоположение точек сшивки находится из условия максимальной близости в этих точках вторых производных полинома Эрмита и сшиваемых кривых, т. е. из условия максимально гладкого прилегания полинома Эрмита к сшиваемым кривым. Оптимальное расположение точек сшивки ищется с помощью модуля LOKMIN.

Программа TDS-SSHVK. Предназначена для сшивки УРСов с соблюдением термодинамической совместности (ТДС).

Согласно законам термодинамики [4] УРСы должны удовлетворять условию ТДС

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

Выполнение этого условия в области сшивки обеспечивается тем, что сшивается свободная энергия: $F = E + PV - TS$. Изотермы или изохоры свободной энергии, принадлежащие разным УРСам, сшиваются полиномом Эрмита пятой степени, поскольку давление и удельная вну-

тренняя энергия являются производными от свободной энергии, а такие важные характеристики, как теплоемкость и скорость звука, определяются через вторые производные. Местоположение точек сшивки может быть задано в информации к программе или определяется из условия максимальной близости в этих точках третьих производных полинома Эрмита и сшиваемых кривых. Эта программа позволяет строить широкодиапазонные УРСы, которые всюду удовлетворяют условию ТДС.

Программа TBLTR. Используется для табулирования ТДФ одной и двух переменных.

Табулирование проводится на заданной сетке или с автоматическим выбором оптимальных сеток, когда выбирается минимальное число узлов таблицы, с тем чтобы обеспечить нужную точность интерполяции. Оптимальное число узлов сетки определяется с помощью модуля LOKMIN. Оптимальные и заданные сетки могут быть равномерные или равномерно-логарифмические. В разных частях области табулирования ТДФ могут описываться разными УРСами.

В программе TBLTR имеются пополняемые библиотеки видов аргументов и функций, способов интерполяции, критериев оптимальности таблиц и типов пробных сеток, на которых вычисляются погрешности интерполяции функций. Программа обеспечивает построение прикладных УРСов в табличной форме.

Программа FLOBER. Предназначена для сглаживания функций одной и двух переменных путем фильтрации спектра Фурье.

Эта программа необходима, если исходные функции имеют "рябь" математического происхождения, например, в расчетных данных по теоретическим моделям. В программе предусмотрены средства визуализации для контроля качества сглаживания и возможность управления процессом сглаживания с помощью параметров фильтра.

Программы VSTDS-1 и VSTDS-2. Используются для проверки и восстановления ТДС тепловых и потенциальных составляющих давления и энергии соответственно.

Восстановление ТДС проводится путем внесения в давление и энергию поправок, причем невязка в уравнении ТДС распределяется между давлением и энергией в заданной пропорции. Эти программы позволяют повысить точность

тех УРСов и теоретических моделей (например моделей ТФП — см. ниже), в которых ТДС не выполняется.

В специализированных программах предусмотрено масштабирование термодинамических величин, так что результат может быть представлен в любой системе единиц измерения.

Библиотека теоретических моделей термодинамических свойств веществ

В библиотеке теоретических моделей термодинамических свойств веществ содержатся следующие программы.

Программа ТФПК. Предназначена для расчета термодинамических параметров по модели Томаса—Ферми с квантовыми и обменными поправками [5] (модель ТФП) с описанием вклада теплового движения ядер по модели Копышева [6] (модель ТФПК). Эта программа предоставлена сотрудниками РФЯЦ-ВНИИЭФ В. П. Копышевым и В. В. Хрустальевым.

Программа ПЛАЗМА-4. Предназначена для расчета ионизационного равновесия в газах по модифицированной модели Саха [7]. Программа ПЛАЗМА-4 предоставлена Н. Н. Калиткиным (ИПМ им. М. В. Келдыша РАН).

Программа GESMGO. Предназначена для расчета термодинамических параметров гомогенных и гетерогенных термомеханически равновесных смесей веществ, а также гетерогенных смесей компонентов, представляющих собой гомогенные смеси.

В гомогенной смеси компоненты перемешаны на атомарном или молекулярном уровне (химические соединения, сплавы, растворы и смеси газов). Гетерогенная смесь — это смесь макрочастиц компонентов, каждый из которых состоит из атомов одного элемента или их смеси. Условием равновесия гомогенных смесей является постоянство температуры и непрерывность электронной плотности во всем объеме, т. е. равенство электронных давлений компонентов. Для гетерогенной смеси условием термодинамического равновесия является равенство температур и полных давлений компонентов.

Кроме термодинамических параметров, программа рассчитывает ударные адиабаты и изэнтропы разгрузки.

Программа ВУРС. Предназначена для расчета свойств плотных молекулярных газов и жидкостей и их смесей на основе вариационной теории возмущений в форме М. Росса [8, 9]. Взаимодействие молекул описывается потенциалом ехр-6. Диапазон применимости модели по плотности — от нуля до точки затвердевания при заданной температуре. Диапазон по температуре — от температуры плавления при данной плотности до начала диссоциации.

Результаты расчетов по программам ТФПК, ПЛАЗМА-4, GESMGO и ВУРС необходимы для построения широкодиапазонных табличных УРСов.

Программа PLLINTR. Предназначена для расчета параметров твердого тела и жидкости при плавлении по закону Линдемана и правилу Трутона [3].

По закону плавления Линдемана твердое тело плавится при температуре, которая определяется дифференциальным уравнением

$$\frac{d(\ln T_{\text{пл}})}{d(\ln \rho_{\text{пл}})} = 2\Gamma_{\text{реш}} - \frac{2}{3},$$

где $\Gamma_{\text{реш}}$ — коэффициент Грюнайзена решетки твердого тела, определяемый по УРСу.

Правило Трутона задает зависимость теплоты плавления от температуры плавления, которая имеет вид

$$Q_{\text{пл}} = Q_{\text{пл}}^0 \frac{T_{\text{пл}}}{T_{\text{пл}}^0},$$

где $Q_{\text{пл}}^0$ — теплота плавления при $T = T_{\text{пл}}^0$.

Из правила Трутона и уравнения Клапейрона—Клаузиуса

$$\frac{dP}{dT} = \frac{Q_{\text{пл}}}{T_{\text{пл}} \Delta V_{\text{пл}}}$$

получается соотношение для объемного эффекта при плавлении в виде

$$\Delta V_{\text{пл}} = \frac{Q_{\text{пл}}^0}{T_{\text{пл}}^0} \left/ \frac{dP}{dT} \right.$$

Программа PLLINTR необходима при построении УРСов с учетом плавления, когда недостаточно экспериментальных данных о параметрах при плавлении.

Библиотеки УРСов и наборов констант

Библиотека программ УРСов содержит УРСы двух видов.

К первому виду относятся УРСы, представляющие только научный интерес, поскольку по своим характеристикам, например экономичности, они не годятся для применения в программах расчета динамики сред. Такие УРСы могут быть полезны для построения прикладных УРСов как источник информации о термодинамических свойствах веществ.

Ко второму виду относятся прикладные УРСы, которые являются непрерывными, гладкими и удовлетворяют условиям нормальности вещества по Бете—Вейлю в необходимом диапазоне плотностей и температур, а также достаточно экономичны для вычислений на ЭВМ. Условия Бете—Вейля имеют вид

- 1) $P \rightarrow +\infty$ при $\rho \rightarrow +\infty$ и $T = \text{const}$;
- 2) $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_T < 0$;
- 3) $\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)_T > 0$;
- 4) $\left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = C_V > 0$.

Первое условие обеспечивает *безавоность* решения задач динамики сплошных сред, поскольку ограничивает плотность при конечном давлении. Второе, называемое условием термодинамической устойчивости, обеспечивает корректность задачи газодинамики с начальными данными. Третье условие называется условием выпуклости УРСа и обеспечивает устойчивость УВ сжатия. Справедливость четвертого условия доказана в термодинамике [4]. При решении задач адиабатической газодинамики условия 2 и 3 могут быть ослаблены, а именно достаточно соблюдены соответственно условия $\left(\frac{\partial P}{\partial V}\right)_S < 0$ и $\left(\frac{\partial^2 P}{\partial V^2}\right)_S > 0$, где S — энтропия. Прикладные УРСы могут использоваться в программах расчета динамики сжимаемых сред.

Программа УРСа состоит из подпрограммы пересчета констант УРСа и подпрограммы вычисления ТДФ. Подпрограмма пересчета констант из заданного набора констант УРСа формирует пересчитанный набор констант, необходимый для экономичного расчета давления и энергии по плотности и температуре. Подпрограмма расчета ТДФ по заданным значениям плотности ρ и температуры T рассчитывает дав-

ление P и энергию E , а также их потенциальные составляющие.

Для взаимодействия специализированных программ комплекса ТУР с библиотеками УРСов и предназначенных для них наборов констант создан модуль COMPUR, который использует модули оперативного компилятора [10].

Работа с УРСами происходит следующим образом. Во входной информации к специализированной программе задаются *имена* необходимых веществ. Имя вещества имеет вид NYNB, где NY — двузначный номер УРСа в библиотеке, NB — двузначный номер набора констант в библиотеке наборов констант. Набор констант для УРСа можно вводить не только из библиотеки, но также из файла с входной информацией к задаче или из отдельного файла.

Возможности комплекса ТУР

Все библиотеки комплекса ТУР могут пополняться. Любой программе из библиотеки специализированных программ доступен любой УРС из библиотеки УРСов и библиотеки теоретических моделей. Библиотечные программы УРСов используют предназначенные для них наборы констант из библиотеки наборов констант.

Комплекс программ ТУР реализован на языке программирования Фортран.

На рис. 1—5 приведены иллюстрации некоторых возможностей комплекса ТУР.

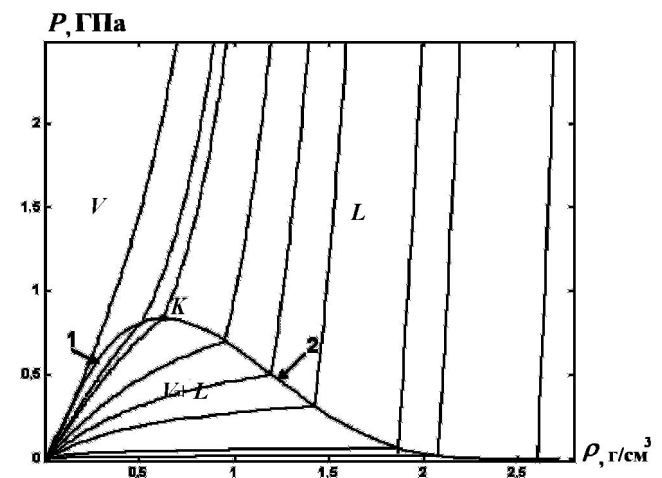


Рис. 1. Фазовая диаграмма и изэнтропы алюминия: L — жидкость; V — пар; V + L — равновесная смесь пара и жидкости; 1 — линия конденсации; 2 — линия испарения; K — критическая точка

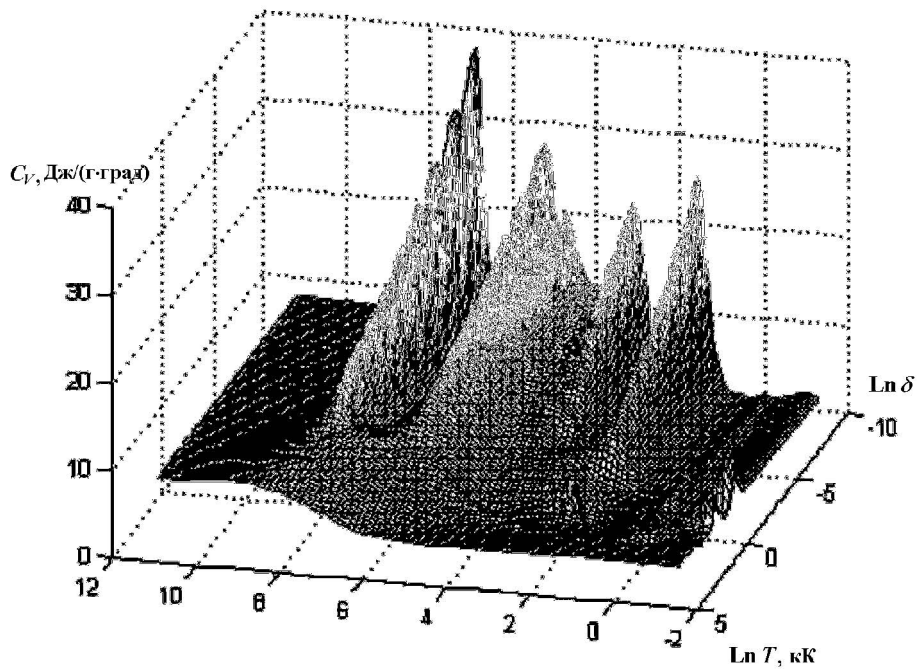


Рис. 2. Теплоемкость воды в широком диапазоне плотностей и температур

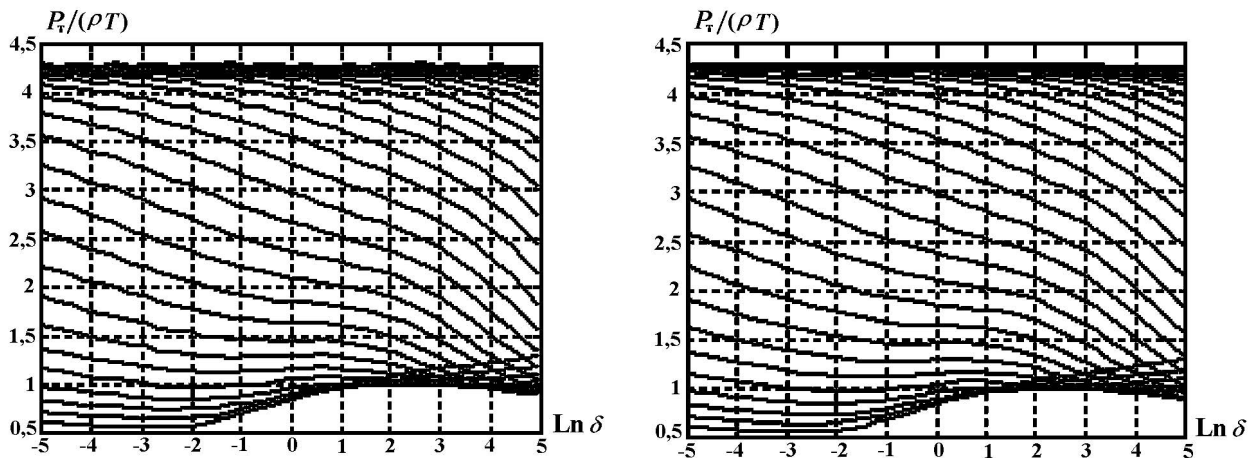


Рис. 3. Изотермы функции $\Pi = P_T/(\rho T)$ по модели ТФПК до (слева) и после (справа) сглаживания

На рис. 1 (см. также цветную вкладку) представлены фазовая диаграмма и изэнтропы алюминия в области испарения.

На рис. 2 (см. также цветную вкладку) приведена теплоемкость воды в широком диапазоне плотностей и температур по табличному УРСу, который описывает испарение, диссоциацию и ионизацию [11]. "Пики, хребты и овраги" на рис. 2 — это результат влияния на теплоемкость воды процессов разрыва водородных связей, возбуждения внутренних колебаний молекул, диссоциации и ионизации.

На рис. 3 приведены изотермы функции $\Pi = P_T/(\rho T)$ (P_T — тепловое давление) по модели

ТФПК до сглаживания (на отдельных изотермах видна рябь математического происхождения) и после сглаживания. Сглаженные данные уже можно использовать, например, при шивке.

На рис. 4 приведены результаты шивки изохор функции $\varepsilon = E_T/T$ (E_T — тепловая энергия) по полуэмпирическому УРСу на основе модели Дебая (область низких температур) и по модели ТФПК (область высоких температур).

На рис. 5 приведены ударная адиабата и изэнтропы разгрузки воды по УРСу [11]. Зигзаг на ударной адиабате при $P \approx 50$ ГПа объясняется диссоциацией воды.

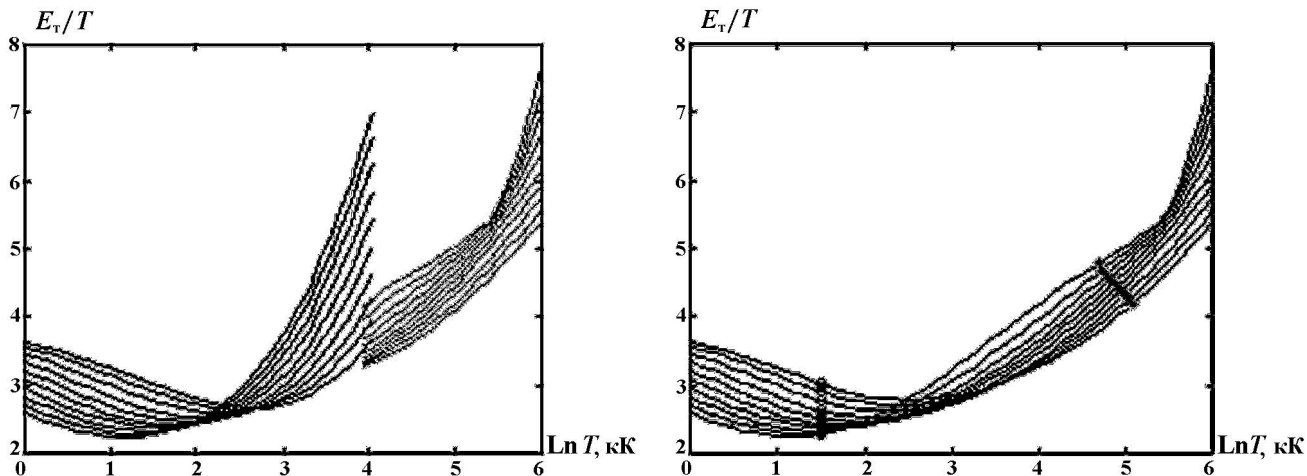
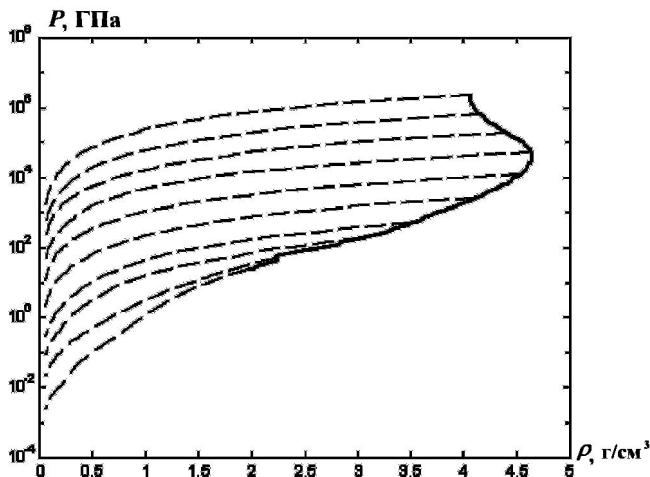
Рис. 4. Изохоры функции $\varepsilon = E_T/T$ до (слева) и после (справа) сшивки

Рис. 5. Ударная адиабата (—) и изэнтропы разгрузки (- - -) воды

Для удобства взаимодействия пользователя с комплексом ТУР на базе современных технологий создана интерактивная сервисная оболочка [12], которая позволяет с помощью оконного интерфейса выполнять необходимый набор функций при работе с комплексом. Оболочка включает в себя информационную базу данных об УРСах и наборах констант к ним, систему для задания входных данных и запуска счетных программ, вспомогательные средства для сохранения вариантов запуска счетных программ и средства визуализации результатов.

Таким образом, комплекс программ ТУР является удобным и эффективным инструментом для построения и исследования УРСов, в том числе многофазных.

Список литературы

1. Д. М. Химмельблау. Прикладное нелинейное программирование. М.: Мир, 1975.
2. Форсайт Дж., Малькольм М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. М.: Мир, 1980.
3. Жарков В. Н., Калинин В. А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968.
4. Базаров И. П. Термодинамика. М.: Высшая школа, 1991.
5. Калиткин Н. Н., Кузьмина Л. В. Таблицы термодинамических функций вещества при высокой концентрации энергии: Препринт № 35. М.: ИПМ АН СССР, 1975.
6. Копышев В. П. О термодинамике ядер одноатомного вещества // Числ. методы мех. спл. среды. 1977. Т. 8, № 6. С. 54–67.
7. Калиткин Н. Н., Ритус И. В., Миронов А. М. Ионизационное равновесие с учетом вырождения электронов (Плазма-4): Препринт № 46. М.: ИПМ АН СССР, 1983.
8. Дремов В. В., Модестов Д. Г. Расчет кривых плавления и ударных адиабат хлорпроизводных метана // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 1998. Вып. 1. С. 54–58.
9. Dremov V. V., Modestov D. G. Calculation of shock compression parameters for chlorinated

- methanes / Chem. Phys. Reports. 1998. Vol. 17(4). P. 781–790.
10. *Легоньков В. И., Соколов В. П., Старостина А. А.* Система оперативной компиляции некоторых модульных объектов в прикладных программах // Числ. методы мех. спл. среды. 1977. Т. 8, № 3. С. 112–120.
11. *Dremov V. V., Sapozhnikov A. T., Smirnova M. A.* Wide range equation of state of water taking into account evaporation, dissociation and ionization // Shock Compression of Condensed Matter—2003 / Ed. by M. D. Furnish, Y. M. Gupta and J. W. Forbes. Melville, N.—Y.: AIP, 2004. P. 49.
12. *Вербицкая О. В., Кузнецова О. В., Миронова Е. Е., Сапожников А. Т., Соколов В. П.* Интегрированная информационно-технологическая среда для разработки уравнений состояний // См. настоящий выпуск. С. 37–45.

Статья поступила в редакцию 09.07.07.
