

Секция «Высокопроизводительные вычисления и математическое моделирование»

Широкодиапазонное полуэмпирическое уравнение состояния меди в форме модели РОСА-МФИ

Арапов И.Н.¹, Гударенко Л.Ф.², Гордеев Д.Г.³, Каякин А.А.⁴, Данилов А.С.⁵

1 - Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия, *E-mail: arapov.98.98@mail.ru*; 2 - Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия, *E-mail: inarapov@internet.ru*; 3 - Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия, *E-mail: gdg81ru@yandex.ru*; 4 - Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия, *E-mail: ilya.arapov@vk.com*; 5 - Российский федеральный ядерный центр — Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики, Саров, Россия, *E-mail: arapovilya777@gmail.com*

Описан вариант модификации, используемой во РФЯЦ-ВНИИЭФ полуэмпирической модели широкодиапазонных уравнений состояния РОСА-МИ [1], [2]. При модификации модель РОСА-МИ, позволяющая описывать свойства веществ при фазовом переходе жидкость – пар, дополнена алгоритмами для описания термодинамических свойств при фазовом переходе твердое тело-жидкость (плавление). Название модифицированной модели - РОСА-МФИ. В алгоритмах, описывающих процесс плавления, используются локальные модели для описания свойств твердого тела и жидкости, в областях плавления и испарения вещество представляется как смесь двух фаз. Модель содержит ряд свободных параметров, значения которых определяются при разработке уравнения состояния конкретного вещества. Аналитические выражения в модели, позволяют, не используя табличную форму представления, реализовать модель в виде программного модуля для расчета термодинамических функций по входным переменным: плотность – температура, плотность – энергия, плотность – давление по всей области определения УРС.

Эффективность модели РОСА-МФИ проверена на примере разработки уравнения состояния одного из хорошо исследованных веществ – меди. На рисунках, представленных в докладе проводится сравнение расчетов по разработанному УРС с многочисленными экспериментальными данными и расчетами по другим моделям. Показано, что расчеты по разработанному УРС описывают как экспериментальные данные, так и результаты расчетов по теоретическим моделям (не учитывающих оболочечные эффекты) в области сверхвысоких давлений и температур. Показано также, что учет в модели изменения свойств вещества при плавлении позволил повысить точность описания экспериментальных данных по сравнению с ранее разработанным УРС меди в форме модели РОСА-МИ.

Источники и литература

- 1) 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. No. 1. С. 106-120.
- 2) Каякин А. А., Гударенко Л. Ф., Гордеев Д. Г. Уравнение состояния соединений изотопов лития с изотопами водорода // Физика горения и взрыва. 2014. Т. 50. No. 5. С. 109-122.