

Научная документация

1 Уравнения состояния	2
1.1 Краткие сведения из термодинамики	2
1.2 Некоторые уравнения состояния	4
Идеальный газ	4
Двучленное уравнение состояния	5
Уравнение состояния Ми – Грюнайзена	8
Уравнение состояния Гюгонио	11
Уравнение состояния Тейта	12
Уравнение состояния Бёрча – Мурнагана	13
1.3 Уравнение состояния смеси	14
1.3.1 Схема 1.	15
1.3.2 Схема 2.	17
2 Классическая газодинамика	22
2.1 Математическая модель	22
2.2 Приближенные римановские решатели	22
2.3 Интегрирование по времени	22
3 Многоматериальная газодинамика. Равновесная РТ-модель.	23
4 Приложения/утилиты	24
4.1 Геометрия	24
4.1.1 Сечения прямоугольников	24
4.1.2 Сечения кубоидов	28
4.2 Специальные функции	28
5 Приложения	32
5.1 Выкладки	32
5.1.1 Двучленное уравнение состояния и Stiffened Gas	32
5.1.2 Ми – Грюнайзена и Мурнагана	33

Глава 1

Уравнения состояния

1.1 Краткие сведения из термодинамики

Каноническим уравнением состояния называется зависимость одного из четырех термодинамических потенциалов от пары своих естественных переменных:

$$\begin{aligned} U &= U(S, V) && \text{— внутренняя энергия,} \\ H &= H(S, P) && \text{— энтальпия,} \\ F &= F(T, V) && \text{— свободная энергия Гельмгольца,} \\ G &= G(T, P) && \text{— потенциал Гиббса,} \end{aligned}$$

здесь V — объем, T — температура, P — давление. Имея выражение для одного из потенциалов в естественных переменных, можно получить выражение для любого другого потенциала в любых переменных, а также зависимость любой переменной от пары других.

К примеру, пусть задано каноническое уравнение состояния $U(S, V)$, тогда из первого начала термодинамики следуют выражения для температуры и давления

$$dU = T dS - P dV \Rightarrow T(S, V) = \left(\frac{\partial U}{\partial S} \right)_V, \quad P(S, V) = - \left(\frac{\partial U}{\partial V} \right)_S,$$

здесь индексы V и S при производных обозначают дифференцирование при постоянном объеме и энтропии соответственно.

В расчетной практике удобнее использовать удельные (отнесенные к массе) величины: удельный объем $v = 1/\rho$, где ρ — плотность, удельная внутренняя энергия e , удельная энтропия s , иногда также удельная энтальпия h . В дальнейшем слово «удельный» в большинстве случаев будет опускаться. Величины e и h имеют размерность квадрата скорости.

Пусть у нас имеется «практически каноническое» уравнение состояния для удельной внутренней энергии $e = e(\rho, s)$. Для удельной внутренней энергии также справедливо первое на-

чало термодинамики, которое можно записать в виде

$$de = T ds + \frac{P}{\rho^2} d\rho, \quad (1.1)$$

отсюда можно получить формулы для давления и температуры в естественных переменных

$$P(\rho, s) = \rho^2 \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_s \quad \text{и} \quad T(\rho, s) = \left(\frac{\partial e}{\partial s} \right)_\rho. \quad (1.2)$$

Энтропию можно исключить из формул, для этого достаточно выразить $s(\rho, e)$ из выражения для внутренней энергии и подставить в формулы (1.2). Таким образом, можно считать, что у нас имеются выражения $P(\rho, e)$ и $T(\rho, e)$.

Другим важным параметром для газодинамики является скорость звука c . Квадрат скорости звука определяется в изоэнтропийном процессе

$$c^2(\rho, s) = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s, \quad (1.3)$$

Поскольку в расчетах чаще используется зависимость без энтропии $P(\rho, e)$, выражение для скорости звука будет удобнее переписать в переменных (ρ, e) . Рассмотрим изоэнтропийный процесс, из первого начала (1.1) следует, что вся внутренняя энергия *идет на работу* $de = P d\rho / \rho^2$, запишем полный дифференциал давления в различных переменных:

$$\begin{aligned} dP(\rho, s) &= \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_s d\rho = c^2 d\rho \\ dP(\rho, e) &= \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e d\rho + \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho de = \left[\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e + \frac{P}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho \right] d\rho \end{aligned}$$

откуда следует, что

$$c^2(\rho, e) = \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e + \frac{P}{\rho^2} \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho. \quad (1.4)$$

Использование энтропии на практике не очень удобно, поэтому вместо канонического уравнения состояния обычно используется пара из термического уравнения состояния и калорического уравнения состояния. *Термическое уравнение состояния* связывает температуру, давление и объем (плотность). *Калорическое уравнение состояния* включает зависимость для внутренней энергии. Рассмотрим для примера идеальный газ. Термическое уравнение состояния для идеального газа это уравнение Менделеева – Клапейрона:

$$P = \frac{R}{\mu} \rho T = (\gamma - 1) c_v \rho T,$$

в формуле учтено, что $R = (\gamma - 1)\mu c_v$, γ — показатель адиабаты, R — универсальная газовая постоянная, μ — молярная масса. Внутренняя энергия идеального газа не зависит от объема и давления, калорическое уравнение состояния имеет вид $e = c_v T$, где c_v — удельная изохорная теплоемкость.

Классический вид законов, используемый в газодинамике для описания идеальных газов:

$$P(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho e, \quad e(\rho, T) = c_v T.$$

Каноническое уравнение состояния $e(\rho, s)$ исчерпывающее описывает термодинамическую систему, в то время как только одного из уравнений $P(\rho, e)$ или $e(\rho, T)$ недостаточно для полного описания.

Наличие двух зависимостей позволяет восстановить вид канонического уравнения состояния $e(\rho, s)$. Выполним на примере идеального газа. Как и ранее, пишем полный дифференциал внутренней энергии (= первое начало термодинамики):

$$\begin{aligned} de &= T(\rho, e(\rho, s))ds + \frac{P(\rho, e(\rho, s))}{\rho^2} d\rho = \frac{1}{c_v} e(\rho, s) ds + \frac{1}{\rho^2} (\gamma - 1) \rho e(\rho, s) d\rho = \\ &e(\rho, s) \left(d\frac{s}{c_v} + (\gamma - 1) d\ln \rho \right) = e(\rho, s) d\left(\frac{s}{c_v} + \ln \rho^{\gamma-1} \right). \end{aligned}$$

Далее разделяем переменные:

$$\frac{de}{e(\rho, s)} = d\ln e = d\left(\frac{s}{c_v} + \ln \rho^{\gamma-1} \right),$$

после интегрирования получаем:

$$e(\rho, s) = e_0 \exp\left(\frac{s-s_0}{c_v}\right) \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1}$$

— это и есть каноническое уравнение состояния идеального газа. Физики-теоретики ту же формулу запишут в виде

$$U(S, V, N) = \hat{c}_v k N \left(\frac{N\Phi}{V} \exp\left(\frac{S}{kN}\right) \right)^{\frac{1}{\hat{c}_v}}, \quad (1.5)$$

где \hat{c}_v — безразмерная теплоемкость при постоянном объеме, N — число частиц, k — постоянная Больцмана и Φ — некоторая константа.

1.2 Некоторые уравнения состояния

Несколько слов о том, какие зависимости представляются и почему они.

Идеальный газ

Простейшее уравнение состояния:

$$P(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho e,$$

$$P(\rho, T) = (\gamma - 1)c_v \rho T,$$

$$e(\rho, P) = \frac{P}{(\gamma - 1)\rho},$$

$$e(\rho, T) = c_v T,$$

$$c^2(\rho, P) = \gamma \frac{P}{\rho},$$

$$c^2(\rho, e) = \gamma(\gamma - 1)e,$$

$$c^2(\rho, T) = \gamma(\gamma - 1)c_v T.$$

Каноническое уравнение состояния:

$$e(\rho, s) = A \exp\left(\frac{s-s_0}{c_v}\right) \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1}.$$

Двучленное уравнение состояния

Двучленное уравнение состояния является несложным обобщением уравнения состояния идеального газа. Двучленное уравнение состояния используется для моделирования процессов в жидкостях, а также в металлах при высоких давлениях. К формуле для давления добавляется линейное слагаемое по плотности [?]:

$$P(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho e + c_0^2(\rho - \rho_0).$$

Вместо пары констант c_0, ρ_0 часто используются константы:

$$P_0 = \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma}, \quad e_0 = -\frac{c_0^2}{\gamma - 1}.$$

С такими константами уравнение принимает вид:

$$P(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho(e - e_0) - \gamma P_0.$$

Хотя такая замена не эквивалентна. Первая формула указывает на положительность коэффициента перед плотностью (c_0^2), а при $c_0 = 0$ автоматически исключается параметр ρ_0 . Двучленное уравнение состояния переходит в уравнение состояния идеального газа при $P_0 = 0$,

$e_0 = 0$ или $c_0 = 0$.

Единственного уравнения $P(\rho, e)$ достаточно при решении задач механики сплошной среды без участия температуры. Однако для полного описания термодинамической системы его следует дополнить термическим уравнением состояния. Термическое уравнение состояния можно вывести из $P(\rho, e)$, если сделать допущение $(de/dT)_\rho = c_v = \text{const}$. Для этого необходимо воспользоваться общей теорией термодинамики, покрутить термодинамические потенциалы и соотношения Максвелла. Пример такого вывода есть в работе Сауреля [?] для уравнения состояния, близкого к двучленному.

Допущение $c_v = \text{const}$ означает, что $e(\rho, T) = c_v T + f(\rho)$. После различных преобразований (выкладки есть в разделе 5.1.1), решения дифференциальных уравнений, мы приходим к тому, что энтропийная функция $\sigma(s)$ определяется с точностью до двух констант e_1, e_2 :

$$\sigma(s) = e_1 \exp\left(\frac{s-s_0}{c_v}\right) + e_2.$$

При этом константа e_1 не влияет на форму термического уравнения состояния, а от выбора константы e_2 зависит выражение $P(\rho, T)$.

Первый вариант — просто положить $e_2 = 0$. Так и поступает Саурель, в упомянутой выше работе [?]. Если честно, его объяснение, почему он так делает, не кажется очень убедительным. При таком подходе получается следующее уравнение состояния:

$$P(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho(e - e_0) - \gamma P_0,$$

$$P(\rho, T) = (\gamma - 1)c_v\rho T - P_0,$$

$$e(\rho, P) = \frac{P + \gamma P_0}{(\gamma - 1)\rho},$$

$$e(\rho, T) = c_v T + e_0 + \frac{P_0}{\rho},$$

$$c^2(\rho, e) = \gamma(\gamma - 1)\left(e - e_0 - \frac{P_0}{\rho}\right),$$

$$c^2(\rho, P) = \gamma \frac{P + P_0}{\rho},$$

$$c^2(\rho, T) = \gamma(\gamma - 1)c_v T.$$

Каноническое уравнение состояния:

$$e(\rho, s) = A \exp\left(\frac{s-s_0}{c_v}\right) \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1} + \frac{P_0}{\rho} + e_0.$$

Уравнение состояния в таком виде чаще используется в англоязычной литературе, оно встречается под названием «**Stiffened Gas**» (жёсткий газ?).

Если константа e_2 отлична от нуля, тогда получаем формулы:

$$\begin{aligned} P(\rho, e) &= (\gamma - 1)\rho(e - e_0) - \gamma P_0, \\ P(\rho, T) &= (\gamma - 1)c_v\rho T + P_0 \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right], \\ e(\rho, P) &= \frac{P + \gamma P_0}{(\gamma - 1)\rho}, \\ e(\rho, T) &= c_v T + e_0 + \frac{P_0}{\rho} - \frac{e_0}{\gamma} \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma-1}, \\ c^2(\rho, P) &= \gamma \frac{P + P_0}{\rho}, \\ c^2(\rho, e) &= \gamma(\gamma - 1) \left(e - e_0 - \frac{P_0}{\rho} \right), \\ c^2(\rho, T) &= \gamma(\gamma - 1)c_v T + c_0^2 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma-1}. \end{aligned}$$

Каноническое уравнение состояния:

$$e(\rho, s) = \left[A \exp \left(\frac{s-s_0}{c_v} \right) - \frac{e_0}{\gamma} \right] \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\gamma-1} + \frac{P_0}{\rho} + e_0.$$

Константа e_2 подобрана таким образом, что упругая часть давления в выражении $P(\rho, T)$ обращается в ноль при $\rho = \rho_0$ [?]. Данная форма уравнений состояния отличается от Stiffened Gas наличием степенного слагаемого в выражениях с температурой, а также каноническим уравнением состояния. Годунов в работе [?] не конкретизирует вид энтропийной функции, поскольку в расчетах газодинамики это не имеет значения. Ключевое отличие двух форм двучленного уравнения состояния проявляется именно в канонической форме и обусловлено выбором энтропийной функции.

Уравнение состояния в таком виде чаще встречается в русскоязычной литературе, к примеру, у Шуршалова [?] и Хищенко [?], а Хищенко мы доверяем. Аналогичная форма двучленного уравнения состояния приводится в работе Лемонса [?]. В этой работе уравнение выводится из общих соображений для уравнения состояния в форме Ми – Грюнайзена. При разложении произвольной функции по малому параметру $(\rho - \rho_0)$ получается аналогичное выражение для энергии $e(\rho, T)$.

Двучленное уравнение состояния допускает отрицательные давления (разрежение), минимальное давление составляет $-P_0$.

Аппроксимация двучленным уравнением состояния

Для двучленного УрС решается...

Возьмем уравнение состояния в форме:

$$P(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho(e - e_0) - \gamma P_0.$$

Тогда константы γ , P_0 и e_0 можно получить, если приравнять значения давления и первых производных при заданном состоянии (ρ, e, P) .

Задано уравнение состояния $P(\rho, e)$:

$$\begin{aligned} P &= P(\rho, e), & P_\rho &= \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e, & P_e &= \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho, \\ \gamma &= 1 + \frac{P_e}{\rho}, & e_0 &= e - \frac{\rho P_\rho}{P_e}, & P_0 &= \frac{\rho P_\rho - P}{\gamma}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Задано уравнение состояния $e(\rho, P)$:

$$\begin{aligned} e &= e(\rho, P), & e_\rho &= \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_P, & e_P &= \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_\rho, \\ \gamma &= 1 + \frac{1}{\rho e_P}, & e_0 &= e + \rho e_\rho, & P_0 &= -\frac{\rho e_\rho + P e_P}{\gamma e_P}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Заданы две функции $1/\rho = v(P, T)$ и $e(P, T)$:

$$\begin{aligned} v &= v(P, T), & v_P &= \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T, & v_T &= \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P, \\ e &= e(P, T), & e_P &= \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_T, & e_T &= \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_P, \\ \Delta &= v_T e_P - v_P e_T, \\ \gamma &= 1 + v \frac{v_T}{\Delta}, & e_0 &= e - v \frac{e_T}{v_T}, & P_0 &= \frac{1}{\gamma} \left(v \frac{e_T}{\Delta} - P \right). \end{aligned} \quad (1.8)$$

Уравнение состояния Ми – Грюнайзена

Аналогичное уравнение состояния было реализовано в классе [Monaghan](#) и в классе [Linear](#) (с параметром $n = 1$):

$$P_{ref}(v) = \frac{B}{n} \left[\left(\frac{v_0}{v} \right)^n - 1 \right], \quad (1.9)$$

$$e_{ref}(v) = \frac{B}{n(n-1)} \left(\left[\left(\frac{v_0}{v} \right)^n + n - 1 \right] v - nv_0 \right), \quad (1.10)$$

здесь референсной является кривая холдного давления $P_{ref}(v)$, при этом референсная энергия получается путем интегрирования, то есть референсные давление и энергия связаны

формулами:

$$e'_{ref}(v) = -P_{ref}(v). \quad (1.11)$$

Чтобы быстро считать производные

$$P'_{ref}(v) = -\frac{n P_{ref}(v) + B}{v}. \quad (1.12)$$

Основная формула

$$P(v, e) - P_{ref}(v) = \frac{\Gamma}{v}(e - e_{ref}(\rho)). \quad (1.13)$$

Производные, без необходимости больших повторных вычислений

$$\left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_e = -\frac{1}{v}(P + B + (n - \Gamma - 1) \cdot P_{ref}(v)), \quad \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_v = \frac{\Gamma}{v}. \quad (1.14)$$

Отсюда можно выразить скорость звука

$$c^2(v, P) = v(B + (1 + \Gamma)P + (n - 1 - \Gamma)P_{ref}(v)) \quad (1.15)$$

Если скомбинировать P и P_{ref} , то можно получить зависимость в другой паре переменных:

$$c^2(v, e) = \Gamma(\Gamma + 1)(e - e_{ref}(v)) + v(B + \gamma P_{ref}(v)). \quad (1.16)$$

Удельный объем $v(P, T)$ удовлетворяет нелинейному уравнению

$$v(P - P_{ref}(v)) = \Gamma C_v(T - T_0), \quad (1.17)$$

Уравнение имеет следующий вид:

$$Ax - x^{-\nu} = C, \quad v = v_0 x, \quad (1.18)$$

константы

$$\nu = \gamma - 1, \quad A = 1 + \frac{nP}{B}, \quad C = \frac{n\Gamma C_v}{v_0 B}(T - T_0), \quad (1.19)$$

при положительных A уравнение имеет единственное решение, при $A \leq 0$ решение может не существовать или не быть единственным. Условие эквивалентно следующему:

$$P > P_{\min} = -B/n. \quad (1.20)$$

Производные v выражаются следующим образом:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T = -\frac{v}{D}, \quad \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P = \frac{\Gamma C_v}{D}, \quad D = B + P + (n - 1)P_{ref}(v). \quad (1.21)$$

Энергия от (P, T) определяется после нахождения удельного объема, а производные:

$$\left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_T = -P_{ref}(v) \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T, \quad \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_T = C_v - P_{ref}c(v) \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P. \quad (1.22)$$

$$P_c(v) = \frac{B}{\gamma} \left[\left(\frac{v_0}{v} \right)^\gamma - 1 \right], \quad e_c(v) = \frac{B}{\gamma(\gamma-1)} \left(\left[\left(\frac{v_0}{v} \right)^\gamma + \gamma - 1 \right] v - \gamma v_0 \right), \quad (1.23)$$

$$P_c(\rho) = \frac{B}{\gamma} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma - 1 \right], \quad e_c(\rho) = \frac{B}{\gamma(\gamma-1)} \left(\left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\gamma + \gamma - 1 \right] \frac{1}{\rho} - \gamma \frac{1}{\rho_0} \right), \quad (1.24)$$

Справедливы соотношения

$$e'_c(v) = -P_c(v), \quad e'_c(\rho) = \frac{1}{\rho^2} P_c(\rho), \quad (1.25)$$

Чтобы быстро считать производные

$$P'_c(v) = -\frac{\gamma P_c(v) + B}{v}, \quad P'_c(\rho) = \frac{\gamma P_c(\rho) + B}{\rho}. \quad (1.26)$$

Основная формула

$$P(\rho, e) - P_c(\rho) = \Gamma \rho (e - e_c(\rho)). \quad (1.27)$$

Производные, без необходимости больших повторных вычислений

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e = \frac{1}{\rho} (P + B + (\gamma - 1 - \Gamma) P_c(\rho)), \quad \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho = \Gamma \rho. \quad (1.28)$$

Отсюда можно выразить скорость звука

$$c^2(\rho, P) = \frac{1}{\rho} (B + (1 + \Gamma)P + (\gamma - 1 - \Gamma)P_c(\rho)) \quad (1.29)$$

Если скомбинировать P и P_c , то можно получить зависимость в другой паре переменных:

$$c^2(\rho, e) = \Gamma(\Gamma + 1)(e - e_c(\rho)) + \frac{B + \gamma P_c(\rho)}{\rho}. \quad (1.30)$$

Удельный объем $v(P, T)$ удовлетворяет нелинейному уравнению

$$v(P - P_c(v)) = \Gamma C_v(T - T_0), \quad (1.31)$$

Уравнение имеет следующий вид:

$$Ax - x^{-\nu} = C, \quad v = v_0 x, \quad (1.32)$$

константы

$$\nu = \gamma - 1, \quad A = 1 + \frac{\gamma P}{B}, \quad C = \frac{\gamma \Gamma C_v}{v_0 B} (T - T_0), \quad (1.33)$$

при положительных A уравнение имеет единственное решение, при $A \leq 0$ решение может не существовать или не быть единственным. Условие эквивалентно следующему:

$$P > P_{\min} = -B/\gamma. \quad (1.34)$$

Производные v выражаются следующим образом:

$$\left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T = -\frac{v}{D}, \quad \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P = \frac{\Gamma C_v}{D}, \quad D = B + P + (\gamma - 1)P_c(v). \quad (1.35)$$

Энергия от (P, T) определяется после нахождения удельного объема, а производные:

$$\left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_T = -P_c(v) \left(\frac{\partial v}{\partial P} \right)_T, \quad \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_T = C_v - P_c(v) \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_P. \quad (1.36)$$

Остались формулы для StiffenedGas.

Есть подозрение, что следует делать вот так

$$T_{ref}(\rho) = T_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\Gamma}, \quad (1.37)$$

$$e(\rho, T) = e_{ref}(\rho) + c_v(T - T_{ref}(\rho)). \quad (1.38)$$

$$P(\rho, T) = P_{ref}(\rho) + \Gamma c_v \rho (T - T_{ref}(\rho)). \quad (1.39)$$

И каноническое уравнение состояния

$$e(\rho, s) = \left[A \exp \left(\frac{s-s_0}{c_v} \right) - c_v T_0 \right] \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^{\Gamma} + e_{ref}(\rho). \quad (1.40)$$

Уравнение состояния Гюгонио

Референсная кривая $P_{ref}(v)$ задается в виде адиабаты Гюгонио, где $\xi = v/v_0$:

$$P_{ref}(\xi) = \begin{cases} \frac{B \cdot (1 - \xi)}{(1 - a(1 - \xi))^2}, & \xi < 1, \text{ -- «сжатие»}, \\ B \cdot (1 - \xi), & \xi \geq 1, \text{ -- «разгрузка»}. \end{cases} \quad (1.41)$$

при этом референсная кривая для энергии $e_{ref}(v)$ также должна быть задана в соответствии с ударной адиабатой:

$$e_{ref}(v) = \frac{1}{2} P_{ref}(v)(v_0 - v). \quad (1.42)$$

Здесь B — объемный модуль упругости (bulk modulus) при референсном удельном объеме v_0 . Энергия и давление связаны по закону Ми–Грюнайзена:

$$v \cdot (P - P_{ref}(v)) = \Gamma \cdot (e - e_{ref}(v)). \quad (1.43)$$

Процедура Уолша–Кристиана.

Пусть референсная кривая $P(v)$ — адиабата Гюгонио, тогда референсная температурная кривая $T(v)$ является решением следующего обыкновенного дифференциального уравнения [?]:

$$T'(v) + \frac{\Gamma}{V_0} T(v) = \frac{1}{C_v} f(v) = \frac{1}{2C_v} (P'(v)(v_0 - v) + P(v)). \quad (1.44)$$

Если перейти к безрамерной величине $\xi = v/v_0$, то получим задачу Коши

$$T'(\xi) + \Gamma T(\xi) = \frac{V_0}{2C_v} (P'(\xi)(1 - \xi) + P(\xi)), \quad T(1) = T_0, \quad \xi = v/v_0, \quad (1.45)$$

решение которой выражается в виде интеграла.

Применение процедуры Уолша–Кристиана для кривой (1.41) при разгрузке ($\xi \geq 1$) дает простое выражение для $T_{ref}(v)$:

$$T_{ref}(\xi) = T_0 \cdot e^{\Gamma(1-\xi)}, \quad \xi \geq 1, \quad (1.46)$$

При сжатии ($\xi < 1$) формула несколько усложняется:

$$T_{ref}(\xi) = \left(T_0 + \frac{Bv_0}{2a^2 C_v} \left[3 - g + A e^{-\Gamma(1-\xi)} - C (\text{Ei}(gX) - \text{Ei}(g)) \right] \right) e^{\Gamma(1-\xi)}$$

$$g = \frac{\Gamma}{a}, \quad X = 1 - a(1 - \xi), \quad A = \frac{(4a - \Gamma)(1 - \xi) - 3 + g}{X^2}, \quad C = (2 - 4g + g^2) e^{-g}$$

Энергия и температура связаны по формуле, похожей на закон Ми–Грюнайзена:

$$e - e_{ref}(v) = C_v \cdot (T - T_{ref}(v)). \quad (1.47)$$

Уравнение состояния Тейта

Референсная кривая $P_{ref}(v)$ задается из двух частей, давление на сжатие совпадает с формулой из раздела «Ми–Грюнайзен», давление при растяжении совпадает с формулой из раздела «Гюгонио»:

$$P_{ref}(\xi) = \begin{cases} \frac{B}{n} \left[\left(\frac{v_0}{v} \right)^n - 1 \right], & v < v_0, \text{ -- «сжатие»}, \\ B \cdot \left(1 - \frac{v}{v_0} \right), & v \geq v_0, \text{ -- «разгрузка»}. \end{cases} \quad (1.48)$$

$$e_{ref}(\xi) = \begin{cases} \frac{B}{n(n-1)} \left(\left[\left(\frac{v_0}{v} \right)^n + n - 1 \right] v - nv_0 \right), & v < v_0, \text{ -- «сжатие»}, \\ \frac{Bv_0}{2} \cdot \left(1 - \frac{v}{v_0} \right)^2, & v \geq v_0, \text{ -- «разгрузка»}. \end{cases} \quad (1.49)$$

Референсные кривые удовлетворяют дифференциальному соотношению на всём диапазоне

$$e'_{ref}(v) = -P_{ref}(v), \quad (1.50)$$

кроме того, на участке разгрузки

$$e_{ref}(v) = \frac{1}{2} P_{ref}(v)(v_0 - v). \quad (1.51)$$

Сейчас используется референсная температура в виде константы $T_{ref}(v) = T_0$, хотя можно было бы в области разгрузки сделать экспоненту:

$$T_{ref}(\xi) = \begin{cases} T_0, & v < v_0, \text{ -- «сжатие»}, \\ T_0 \exp \left[\Gamma \left(1 - \frac{v}{v_0} \right) \right], & v \geq v_0, \text{ -- «разгрузка»}. \end{cases} \quad (1.52)$$

Уравнение состояния Бёрча – Мурнагана

Часто используется, будет в качестве примера жести, плюс надо разобраться.

1.3 Уравнение состояния смеси

При заданных массовых концентрациях компонент β_i , уравнение состояния для смеси определяется следующим образом:

$$\begin{cases} v(P, T) = \sum_{i=1}^m \beta_i v_i(P, T), \\ e(P, T) = \sum_{i=1}^m \beta_i e_i(P, T), \end{cases} \quad (1.53)$$

здесь $v = 1/\rho$ — удельный объем, $v_i(P, T)$ и $e_i(P, T)$ уравнения состояния для отдельных компонент. В соответствии с уравнением (1.53) явным образом определяется только внутренняя энергия смеси $e(P, T)$ и удельный объем смеси $v(P, T)$, что эквивалентно заданию $\rho(P, T)$.

Численные схемы обычно требуют получение зависимостей от других переменных. Так, система уравнений гидродинамики вообще не включает температуру, поэтому исключение температуры из системы (1.53) является важной процедурой.

Система уравнений (1.53) является нелинейной, целесообразно решать её с использованием метода Ньютона. В зависимости от того, в какой форме заданы уравнения состояния, можно использовать различные итерационные процедуры. Мы рассмотрим два варианта:

1. Заданы уравнения состояния в форме $v(P, T)$, $e(P, T)$;
2. Заданы уравнения состояния в форме $P(\rho, T)$, $e(\rho, T)$.

Первый вариант кажется естественным, поскольку система (1.53) красивая/симметричная и уже записана в переменных (P, T) . Действительно, в этом случае численное решение системы выписывается довольно изящно, но имеет некоторые практические недостатки.

Во-первых, на практике уравнения состояния редко задаются в такой форме. Сложные уравнения состояния чаще всего имеют форму разложения в ряды по плотности и температуре, аналогично строятся и табличные уравнения состояния, то есть довольно часто от переменных (ρ, T) . В этом случае, плотность выражается неявно. Поэтому кроме итераций по самой системе уравнений (1.53) придется также выполнять итерации внутри уравнения состояния, чтобы выразить плотность $\rho(P, T)$.

Во-вторых, при итерациях по системе (1.53) требуется следить за тем, чтобы давление оставалось в физических границах. Для этого необходимо ввести дополнительную функцию $P_{\min}(T)$, которая выдает давление, при котором плотность вещества обращается в ноль. Для жидкостей P_{\min} может быть меньше нуля (разреженное состояние), для идеального газа $P_{\min} = 0$. В смеси выбирается максимальное P_{\min} из возможных, то есть в смеси с идеальным газом давление обязательно больше нуля.

1.3.1 Схема 1.

Введем обозначения, пусть v^β и e^β — удельный объем и внутренняя энергия смеси как функции от переменных P и T :

$$v^\beta(P, T) = \sum_i \beta_i v_i(P, T), \quad e^\beta(P, T) = \sum_i \beta_i e_i(P, T).$$

Нижним индексом обозначим производные смесевых величин по P или T . К примеру:

$$v_P^\beta = \left(\frac{\partial v^\beta}{\partial P} \right)_T = \sum_i \beta_i \left(\frac{\partial v_i}{\partial P} \right)_T, \quad e_T^\beta = \left(\frac{\partial e^\beta}{\partial T} \right)_P = \sum_i \beta_i \left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \right)_P.$$

Алгоритм $(\rho, T, \beta) \rightarrow (\rho_i, P)$ и $e(\rho, T, \beta)$.

Определить равновесное давление P и истинные плотности компонент ρ_i . Известна плотность смеси ρ (удельный объем v), температура T и массовые концентрации β компонент смеси. Ньютоновские итерации проводятся по первому уравнению системы (1.53). Заданы начальные приближения $\rho_i^{(0)}$ и $P^{(0)}$.

$$P^{(k+1)} = P^{(k)} + \frac{v - v^\beta}{v_P^\beta}, \quad v^\beta = v^\beta(P^{(k)}, T), \quad v_P^\beta = v_P^\beta(P^{(k)}, T). \quad (1.54)$$

На каждой итерации параллельно вычисляются истинные плотности $\rho_i^{(k)} = 1/v_i^{(k)}$. Итерации завершаются при достижении требуемой точности ε по относительному изменению истинных плотностей:

$$\max_{i=1, m} \left| \frac{\rho_i^{(k+1)} - \rho_i^{(k)}}{\rho_i^{(k+1)}} \right| = \max_{i=1, m} \left| 1 - \frac{\rho_i^{(k)}}{\rho_i^{(k+1)}} \right| < \varepsilon. \quad (1.55)$$

Такое условие кажется довольно удачным, поскольку $\rho_i > 0$. По этой причине оценка относительной погрешности довольно адекватна.

При необходимости вычислить производные:

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = - \frac{(v^\beta)^2}{v_P^\beta}, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho = - \frac{v_T^\beta}{v_P^\beta},$$

используются величины v^β , v_P^β и v_T^β , вычисленные на последней итерации.

Вычисление функции $e(\rho, T)$ возможно только после определения давления P . То есть, если значение энергии смеси необходимо, то оптимально вычислять его здесь же. Пусть в результате итераций мы получили давление и производные: P , $\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T$, $\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho$. Тогда

внутреннюю энергию смеси e и производные можно посчитать по формулам:

$$e = e^\beta(P, T), \quad \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_T = e_P^\beta \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T, \quad \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_\rho = e_P^\beta \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho + e_T^\beta.$$

Алгоритм $(\rho, P, \beta) \rightarrow (\rho_i, T)$ и $e(\rho, P, \beta)$.

Определить равновесную температуру T и истинные плотности компонент ρ_i . Известна плотность смеси ρ (удельный объем v), давление P и массовые концентрации β компонент смеси. Постановка задачи симметрична аналогичной для давления. Итерации проводятся по первому уравнению системы (1.53). Заданы начальные приближения $\rho_i^{(0)}$ и $T^{(0)}$.

$$T^{(k+1)} = T^{(k)} + \frac{v - v^\beta}{v_T^\beta}, \quad v^\beta = v^\beta(P, T^{(k)}), \quad v_T^\beta = v_T^\beta(P, T^{(k)}). \quad (1.56)$$

Условия завершения как и ранее (1.55). Формулы для производных:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_P = - \frac{(v^\beta)^2}{v_T^\beta}, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_\rho = - \frac{v_P^\beta}{v_T^\beta},$$

используются значения v^β , v_P^β и v_T^β , вычисленные на последней итерации.

Вычисление функции $e(\rho, P)$ возможно только после определения температуры. То есть, если значение энергии смеси необходимо, то оптимально вычислять его здесь же. Пусть в результате итераций мы получили температуру и производные: T , $\left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_P$, $\left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_\rho$. Тогда внутреннюю энергию смеси e и производные можно посчитать по формулам:

$$e = e^\beta(P, T), \quad \left(\frac{\partial e}{\partial \rho} \right)_P = e_T^\beta \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial \rho} \right)_P, \quad \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_\rho = e_T^\beta \cdot \left(\frac{\partial T}{\partial P} \right)_\rho + e_P^\beta.$$

Алгоритм $(\rho, e, \beta) \rightarrow (\rho_i, P, T)$.

Определить равновесное давление P и температуру T смеси, а также истинные плотности компонент ρ_i . Известна плотность смеси ρ (удельный объем v), внутренняя энергия смеси e и массовые концентрации β компонент смеси.

В данном случае требуется выполнять ньютоновские итерации по обоим уравнениям системы (1.53). Заданы начальные приближения $\rho_i^{(0)}$, $P^{(0)}$ и $T^{(0)}$.

$$\begin{aligned} \Delta &= v_T^\beta e_P^\beta - v_P^\beta e_T^\beta, \\ P^{(k+1)} &= P^{(k)} + \frac{(e - e^\beta) v_T^\beta - (v - v^\beta) e_T^\beta}{\Delta} \\ T^{(k+1)} &= T^{(k)} + \frac{(v - v^\beta) e_P^\beta - (e - e^\beta) v_P^\beta}{\Delta}. \end{aligned} \quad (1.57)$$

Условия завершения как и ранее (1.55). Производные в переменных (ρ, e) :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho = \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_v = \frac{v_T^\beta}{\Delta}, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e = -v^2 \left(\frac{\partial P}{\partial v} \right)_e = v^2 \frac{e_T^\beta}{\Delta}.$$

1.3.2 Схема 2.

В рамках данного раздела считаем, что задана пара уравнений состояния в форме $P_i(\rho, T)$ и $e_i(\rho, T)$, поэтому далее используем сокращения

$$P_{\rho,i} = \left(\frac{\partial P_i}{\partial \rho} \right)_T, \quad P_{T,i} = \left(\frac{\partial P_i}{\partial T} \right)_\rho, \quad e_{\rho,i} = \left(\frac{\partial e_i}{\partial \rho} \right)_T, \quad e_{T,i} = \left(\frac{\partial e_i}{\partial T} \right)_\rho,$$

предполагая, что производная по плотности ρ берется при постоянной температуре T , а производная по температуре T при постоянной плотности ρ .

Введем также обозначения \hat{v}^β и \hat{e}^β — это удельный объем и внутренняя энергия смеси, которые рассматриваются как функции (ρ, T) :

$$\hat{v}^\beta = \sum_i \beta_i v_i(\rho_i, T), \quad \hat{e}^\beta = \sum_i \beta_i e_i(\rho_i, T), \quad \hat{e}_T^\beta = \sum_i \beta_i e_{T,i}(\rho_i, T).$$

Алгоритм $(\rho, T, \beta) \rightarrow (\rho_i, P)$.

Определить равновесное давление P и истинные плотности компонент ρ_i . Известна плотность смеси ρ , температура T и массовые концентрации β компонент смеси. Решается следующая система уравнений:

$$\sum_i \beta_i v_i = v, \quad \forall i, j \quad f(P_i(v_i, T)) = f(P_j(v_j, T)), \quad f(P) \neq 0, \quad f'(P) \neq 0,$$

здесь $f(P)$ — некоторая монотонная функция. Эта система на удельные объемы v_i (плотности ρ_i), давление в системе присутствует только в виде функциональных зависимостей $P_i(v_i, T)$ — уравнение состояния для i -ой компоненты. Число независимых уравнений равно m — числу компонент. Если система уравнений имеет единственное решение, тогда каждое уравнение состояния $P_i(v_i, T)$ в результате выдаст одинаковое давление.

Для простоты можно использовать тождественную функцию $f(P) = P$. Хороший выбор функции $f(P)$ может ускорить сходимость. При подстановке $f(P) = P^{-1}$ для смеси идеальных газов мы получим систему линейных уравнений на v_i , которая методом Ньютона решается за одну итерацию. Были попытки с $f(P) = \frac{1}{P - P_{\min}}$, но работает не стабильно.

Пусть заданы начальные приближения $\rho_i^{(0)}$ или $v_i^{(0)}$. Будем решать систему методом Нью-

тона. Получаем линейную систему на приращения Δv_i :

$$\hat{v}^\beta + \sum_i \beta_i \Delta v_i = v, \quad \hat{v}^\beta = \sum_i \beta_i v_i,$$

$$\forall i, j \quad f(P_i) - \rho_i^2 f'(P_i) P_{\rho,i} \Delta v_i = f(P_j) - \rho_j^2 f'(P_j) P_{\rho,j} \Delta v_j,$$

Схема. Вычисляем вспомогательные величины A_ξ, B_ξ, C_ξ , величины $P_i, P_{\rho,i}, P_{T,i}$ берутся от значений $(\rho_i^{(k)}, T)$ на текущей итерации:

$$\xi_i = \frac{\beta_i}{\rho_i^2 f'(P_i) P_{\rho,i}}, \quad A_\xi = \sum_i \xi_i, \quad B_\xi = \sum_i \xi_i f(P_i), \quad C_\xi = \sum_i \xi_i f'(P_i) P_{T,i}.$$

Неограниченные приращения:

$$\Delta \tilde{v}_i = \frac{1}{\rho_i^2 f'(P_i) P_{\rho,i}} \cdot \left(f(P_i) - \frac{B_\xi}{A_\xi} + \frac{v - \hat{v}^\beta}{A_\xi} \right).$$

Находим максимально возможную константу $\chi < 1$: $v_i^{(k)} + \chi \Delta \tilde{v}_i > 0$. Ограничиваем приращения и считаем новые плотности:

$$\Delta v_i^{(k)} = \chi \cdot \Delta \tilde{v}_i, \quad \rho_i^{(k+1)} = \frac{\rho_i^{(k)}}{1 + \rho_i^{(k)} \Delta v_i^{(k)}}.$$

Условие завершения итераций (1.55) запишем в новой форме:

$$\max \left(\left| 1 - \rho \hat{v}^\beta \right|, \max_i \left| \rho_i^{(k)} \Delta v_i^{(k)} \right| \right) < \varepsilon.$$

После достижения заданной погрешности:

$$P(\rho, T) = f^{-1} \left(\frac{B_\xi}{A_\xi} \right), \quad \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T = \frac{1}{\rho^2 f'(P) A_\xi}, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho = \frac{C_\xi}{f'(P) A_\xi}.$$

Вычисление функции $e(\rho, T)$ возможно только после определения давления P . То есть, если значение энергии смеси необходимо, то оптимально вычислять его здесь же. Пусть в результате итераций мы получили давление и производные: $P, \left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_T, \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_\rho$. Напомню, что у нас заданы уравнения состояния компонент в виде пары $e_i(\rho_i, T)$ и $P_i(\rho_i, T)$. Тогда внутреннюю энергию смеси e и производные можно посчитать по формулам:

$$e = \sum_i \beta_i e_i(\rho_i, P), \quad \left(\frac{\partial e}{\partial P} \right)_T = \sum_i \beta_i \frac{e_{\rho,i}}{P_{\rho,i}}, \quad \left(\frac{\partial e}{\partial T} \right)_P = \sum_i \beta_i \left[e_{T,i} - \frac{e_{\rho,i} P_{T,i}}{P_{\rho,i}} \right].$$

Искомые производные в переменных (ρ, T) :

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_T = \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial P}{\partial \rho}\right)_T, \quad \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho = \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T \left(\frac{\partial P}{\partial T}\right)_\rho + \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P.$$

Алгоритм $(\rho, P, \beta) \rightarrow (\rho_i, T)$ и $e(\rho, P, \beta)$.

Определить равновесную температуру T и истинные плотности компонент ρ_i . Известна плотность смеси ρ (удельный объем v), давление P и массовые концентрации β компонент смеси. Решается система $m+1$ уравнение:

$$\forall i \quad P_i(\rho_i, T) = P, \quad \sum_i \beta_i v_i = v.$$

Схема. Вычисляем вспомогательные величины A_ξ, B_ξ, C_ξ , величины $P_i, P_{\rho,i}, P_{T,i}$ берутся от значений $(\rho_i^{(k)}, T)$ на текущей итерации:

$$\xi_i = \frac{\beta_i}{\rho_i^2 P_{\rho,i}}, \quad A_\xi = \sum_i \xi_i, \quad B_\xi = \sum_i \xi_i P_i, \quad C_\xi = \sum_i \xi_i P_{T,i}.$$

Неограниченные приращения:

$$\Delta \tilde{T} = \frac{v - \hat{v}^\beta + A_\xi P - B_\xi}{C_\xi}, \quad \Delta \tilde{v}_i = \frac{1}{\rho_i^2 P_{\rho,i}} \cdot (P_i - P + P_{T,i} \Delta \tilde{T}),$$

Находим максимально возможную константу $\chi < 1$ такую, что

$$v_i^{(k)} + \chi \Delta \tilde{v}_i > 0, \quad T^{(k)} + \chi \Delta \tilde{T} \in (0, 2T^{(k)}]$$

Ограничиваем приращения и считаем новые плотности:

$$\Delta T^{(k)} = \chi \cdot \Delta \tilde{T}, \quad \Delta v_i^{(k)} = \chi \cdot \Delta \tilde{v}_i, \quad \rho_i^{(k+1)} = \frac{\rho_i^{(k)}}{1 + \rho_i^{(k)} \Delta v_i^{(k)}}.$$

Условие завершения итераций:

$$\max \left(|1 - \rho \hat{v}^\beta|, \max_i |\rho_i^{(k)} \Delta v_i^{(k)}| \right) < \varepsilon, \quad \Delta T < \varepsilon_T \cdot T.$$

Производные в искомых переменных (ρ, P) :

$$\left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_\rho = \frac{A_\xi}{C_\xi}, \quad \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_P = -\frac{1}{\rho^2 C_\xi}.$$

Вычисление функции $e(\rho, P)$ возможно только после определения температуры. То есть, если значение энергии смеси необходимо, то оптимально вычислять его здесь же. Пусть в результате итераций мы получили температуру и производные: $T, \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_P, \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_\rho$. Тогда внутреннюю энергию смеси e и производные можно посчитать по формулам:

$$e = \sum_i \beta_i e_i(\rho_i, P), \quad \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T = \sum_i \beta_i \frac{e_{\rho,i}}{P_{\rho,i}}, \quad \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P = \sum_i \beta_i \left[e_{T,i} - \frac{e_{\rho,i} P_{T,i}}{P_{\rho,i}} \right].$$

Производные в искомых переменных (ρ, P) :

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_P = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial T}{\partial \rho}\right)_P, \quad \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_\rho = \left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_P \left(\frac{\partial T}{\partial P}\right)_\rho + \left(\frac{\partial e}{\partial P}\right)_T.$$

Алгоритм $(\rho, e, \beta) \rightarrow (\rho_i, P, T)$.

Пусть известны массовые концентрации компонент β_i , плотность смеси ρ и внутренняя энергия смеси e . Требуется определить плотности компонент ρ_i , найти равновесные температуру T и давление P . Будем решать следующую систему уравнений:

$$\forall i, j \quad P_i(v_i, T) = P_j(v_j, T), \quad \sum_i \beta_i v_i = v, \quad \sum_i \beta_i e_i(\rho_i, T) = e.$$

Это система из $m + 1$ независимых уравнений: на плотности ρ_i и температуру T , давления здесь присутствуют только в виде некоторых функций $P_i(\rho_i, T)$. Если система уравнений имеет единственное решение, тогда каждое уравнение состояния $P_i(\rho_i, T)$ в результате выдаст одинаковое давление.

Пусть заданы начальные приближения $\rho_i^{(0)}$ и $T^{(0)}$. Распишем метод Ньютона, уравнения на приращения Δv_i и ΔT :

$$\hat{v}^\beta + \sum_i \beta_i \Delta v_i = v, \quad \hat{e}^\beta - \sum_i \beta_i \rho_i^2 e_{\rho,i} \Delta v_i + \hat{e}_T^\beta = e,$$

$$P_i - \rho_i^2 P_{\rho,i} \Delta v_i + P_{T,i} \Delta T = P_j - \rho_j^2 P_{\rho,j} \Delta v_j + P_{T,j} \Delta T,$$

здесь \hat{v}^β и \hat{e}^β — удельный объем и внутренняя энергия смеси, которые рассматриваются как функции (ρ, T) :

$$\hat{v}^\beta = \sum_i \beta_i v_i(\rho_i, T), \quad \hat{e}^\beta = \sum_i \beta_i e_i(\rho_i, T), \quad \hat{e}_T^\beta = \sum_i \beta_i e_{T,i}(\rho_i, T).$$

Схема. Вычисляем вспомогательные величины $A_\xi, B_\xi, C_\xi, A_\eta, B_\eta, C_\eta$. Величины $P_i, P_{\rho,i}$,

$P_{T,i}$, $e_{\rho,i}$ берутся от значений $(\rho_i^{(k)}, T)$ на текущей итерации:

$$\begin{aligned}\xi_i &= \frac{\beta_i}{\rho_i^2 P_{\rho,i}}, & A_\xi &= \sum_i \xi_i, & B_\xi &= \sum_i \xi_i P_i, & C_\xi &= \sum_i \xi_i P_{T,i}, \\ \eta_i &= \frac{\beta_i e_{\rho,i}}{P_{\rho,i}}, & A_\eta &= \sum_i \eta_i, & B_\eta &= \sum_i \eta_i P_i, & C_\eta &= \sum_i \eta_i P_{T,i}.\end{aligned}$$

Неограниченные приращения:

$$\Delta \tilde{T} = \frac{A_\xi B_\eta - A_\eta B_\xi + A_\xi(e - \hat{e}^\beta) + A_\eta(v - \hat{v}^\beta)}{A_\eta C_\xi - A_\xi C_\eta + A_\xi \hat{e}_T^\beta},$$

$$\Delta \tilde{v}_i = \frac{1}{\rho_i^2 P_{\rho,i}} \cdot \left(P_i - \frac{B_\xi}{A_\xi} + \frac{v - \hat{v}^\beta}{A_\xi} + \left(P_T^i - \frac{C_\xi}{A_\xi} \right) \Delta T \right).$$

Находим максимально возможную константу $\chi < 1$: $v_i^{(k)} + \chi \Delta \tilde{v}_i > 0$. Ограничеваем приращения и считаем новые плотности:

$$\Delta T^{(k)} = \chi \cdot \tilde{\Delta} T, \quad \Delta v_i^{(k)} = \chi \cdot \tilde{\Delta} v_i, \quad \rho_i^{(k+1)} = \frac{\rho_i^{(k)}}{1 + \rho_i^{(k)} \Delta v_i^{(k)}}.$$

Условие завершения итераций (1.55) запишем в новой форме:

$$\max \left(|1 - \rho \hat{v}^\beta|, \max_i |\rho_i^{(k)} \Delta v_i^{(k)}| \right) < \varepsilon?$$

Производные в искомых переменных (ρ, e) :

$$\left(\frac{\partial P}{\partial \rho} \right)_e = \frac{\hat{e}_T^\beta - C_\eta}{\rho^2 (C_\xi A_\eta + A_\xi (\hat{e}_T^\beta - C_\eta))}, \quad \left(\frac{\partial P}{\partial e} \right)_\rho = \frac{C_\xi}{C_\xi A_\eta + A_\xi (\hat{e}_T^\beta - C_\eta)}.$$

Глава 2

Классическая газодинамика

2.1 Математическая модель

2.2 Приближенные римановские решатели

2.3 Интегрирование по времени

Глава 3

Многоматериальная газодинамика. Равновесная РТ-модель.

Глава 4

Приложения/утилиты

4.1 Геометрия

4.1.1 Сечения прямоугольников

Уравнение прямой на плоскости имеет вид:

$$\mathbf{r} : (\mathbf{r}, \mathbf{n}) = p \quad \text{или} \quad (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0, \mathbf{n}) = 0.$$

Здесь \mathbf{n} — нормаль к прямой, внешняя по отношению к полуплоскости $(\mathbf{r}, \mathbf{n}) < p$, которую будем называть областью *под прямой*. Вектор \mathbf{r}_0 — произвольная точка на прямой. Параметр p — расстояние от центра координат до прямой со знаком, $p > 0$, если центр координат расположен под прямой, в обратном случае $p < 0$. Если уравнение задано в первой форме, то «опорную» точку на прямой всегда можно получить по формуле $\mathbf{r}_0 = p \cdot \mathbf{n}$.

Прямоугольник со сторонами a и b расположен в центре координат, то есть $|x| < \frac{a}{2}$, $|y| < \frac{b}{2}$. Требуется найти объемную долю α , которую отсекает от него прямая $(\mathbf{r}, \mathbf{n}) = p$. То есть долю прямоугольника, которая располагается под прямой (Рис. 4.1).

$$\xi = \min(a \cdot |n_x|, b \cdot |n_y|), \quad \eta = \max(a \cdot |n_x|, b \cdot |n_y|),$$
$$\alpha(p) = \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{p}{\eta}, & |p| \leq \frac{\eta - \xi}{2}, \\ H(p) - \frac{\operatorname{sgn}(p)}{2\xi\eta} \left(|p| - \frac{\xi + \eta}{2} \right)^2, & \frac{\eta - \xi}{2} < |p| < \frac{\eta + \xi}{2}, \\ H(p), & \frac{\eta + \xi}{2} \leq |p|. \end{cases} \quad (4.1)$$

Здесь $H(p)$ — функция Хевисайда. Последняя строка описывает случаи, когда прямая лежит вне прямоугольника. Очевидно, $\alpha(p \rightarrow -\infty) = 0$ и $\alpha(p \rightarrow \infty) = 1$.

Обратная функция $p(\alpha)$ позволяет найти прямую с нормалью \mathbf{n} , которая проходит через

прямоугольник $|x| < \frac{a}{2}$, $|y| < \frac{b}{2}$ и отсекает от него заданную объемную долю α .

$$\xi = \min(a \cdot |n_x|, b \cdot |n_y|), \quad \eta = \max(a \cdot |n_x|, b \cdot |n_y|),$$

$$p(\alpha) = \begin{cases} \left(\alpha - \frac{1}{2}\right) \cdot \eta, & |2\alpha - 1| \leq 1 - \frac{\xi}{\eta}, \\ \operatorname{sgn}\left(\alpha - \frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{\xi + \eta}{2} - \sqrt{(1 - |2\alpha - 1|)\xi\eta}\right), & |2\alpha - 1| > 1 - \frac{\xi}{\eta}. \end{cases} \quad (4.2)$$

Функция $p(\alpha)$ удовлетворяет свойству симметрии:

$$p(1 - \alpha) = -p(\alpha).$$

Через две квадратных ячейки с объемными долями $0 < \alpha_1, \alpha_2 < 1$ можно провести единственную прямую, которая отсекает заданные объемные доли (Рис. 4.2). Доля грани α_σ , которая отсекается этой прямой, равна:

$$\alpha_\sigma = \begin{cases} \frac{\alpha_{\min} + \alpha_{\max}}{2}, & 3\alpha_{\min} \geq \alpha_{\max} \wedge \alpha_{\min} \geq 3\alpha_{\max} - 2, \\ -2\alpha_{\min} + 2\sqrt{\alpha_{\min} \cdot (\alpha_{\min} + \alpha_{\max})}, & \alpha_{\max} \leq \frac{1}{2} \vee \alpha_{\min} \cdot (1 - \alpha_{\max}) \geq \left(\alpha_{\max} - \frac{1}{2}\right)^2, \\ 3 - 2\alpha_{\max} - 2\sqrt{(1 - \alpha_{\max}) \cdot (2 - \alpha_{\min} - \alpha_{\max})}, & \alpha_{\min} \geq \frac{1}{2} \vee \alpha_{\min} \cdot (1 - \alpha_{\max}) \geq \left(\alpha_{\min} - \frac{1}{2}\right)^2, \\ \frac{\sqrt{\alpha_{\min}}}{\sqrt{1 - \alpha_{\max}} + \sqrt{\alpha_{\min}}}, & \text{иначе.} \end{cases} \quad (4.3)$$

Условия в формуле необходимо проверять последовательно сверху вниз. Формула справедлива также при $\alpha_{\min} = 0$ и $\alpha_{\max} = 1$, получаются значения $\alpha_\sigma = 0$ и $\alpha_\sigma = 1$ соответственно (последняя строка). Значение при $\alpha_{\min} = 0, \alpha_{\max} = 1$ не определено. Можно выбирать произвольным образом. В целом это не важно, поскольку нет необходимости восстанавливать интерфейс в заполненных или пустых ячейках.

Как получена формула? Прямая, проходящая через две ячейки и отсекающая объемные

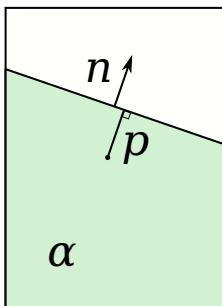


Рис. 4.1:

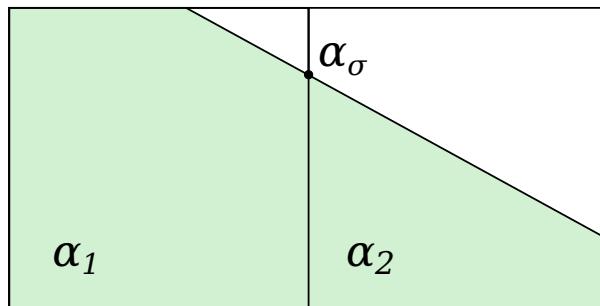


Рис. 4.2:

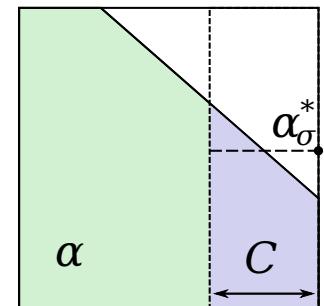


Рис. 4.3:

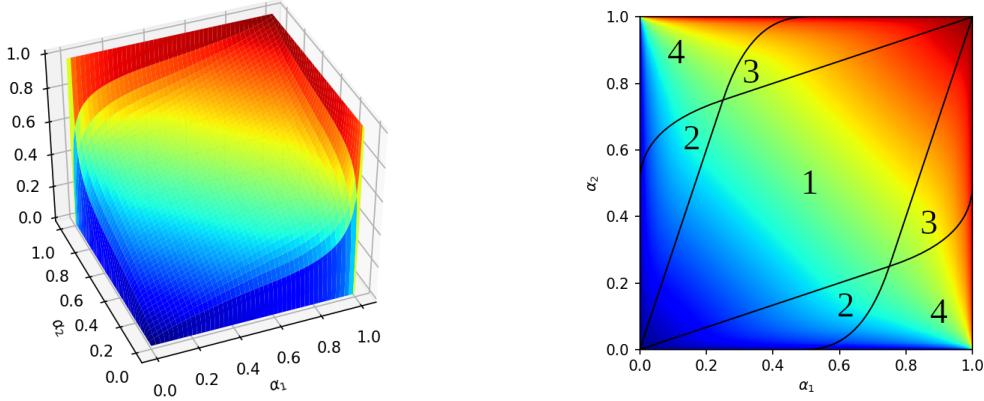


Рис. 4.4: Функция $\alpha_\sigma(\alpha_1, \alpha_2)$. На втором графике обозначены области кусочного задания функции. Каждая область — строка в формуле (4.3).

доли α_1 и α_2 , должна удовлетворять уравнению:

$$p(\alpha_1) = p(\alpha_2) + \cos \varphi,$$

где φ — угол между внешней нормалью к прямой и вектором от центра ячейки с объемной долей α_1 до центра ячейки с долей α_2 . Если рассмотреть все возможные конфигурации расположения прямой, то получим формулу (4.3). Функция $\alpha_\sigma(\alpha_1, \alpha_2)$ имеет сложную структуру и кусочно задается в четырех областях. Функция приведена на Рис. 4.4.

Функцию $\alpha_\sigma(\alpha_1, \alpha_2)$ следует применять при вычислении нормали к реконструированному интерфейсу в ячейке. Для этого нужно использовать метод Гаусса вычисления градиента объемных долей, при этом на грани брать α_σ . После этого нормаль считается как нормализованный градиент объемной доли. При таком определении нормалей в квадратных ячейках, если реальная граница линейна, то она восстанавливается точно.

Однако, не стоит использовать α_σ напрямую при решении задачи переноса. Лучше взять скорректированное значение α_σ^* , которое берется как доля вещества от части ячейки, которая переносится за один временной шаг (Рис. 4.3). Пусть вещество **вытекает** (это важно) из ячейки через грань с внешней нормалью \mathbf{n}_f , то есть нормальная скорость $v_n = (\mathbf{v}, \mathbf{n}_f) > 0$. Объемная доля вещества в ячейке равна α , в ячейке проведена линейная реконструкция интерфейса и проведена нормаль к интерфейсу \mathbf{n} . Определим косинус угла между \mathbf{n} и \mathbf{n}_f , синус угла достаточно знать с точностью до модуля:

$$\cos \varphi = (\mathbf{n}, \mathbf{n}_f), \quad |\sin \varphi| = \sqrt{1 - |\cos \varphi|^2}.$$

Введем также «локальное число Куранта»: $C = \frac{\Delta t v_n S}{V} \leq 1$.

Тогда значение α_σ^* можно рассматривать как функцию трёх аргументов $\alpha_\sigma^*(\alpha, \cos \varphi, C)$. Порядок вычисления α_σ^* следующий. Сначала определим несколько вспомогательных параметров $\xi_1, \eta_1, \xi_2, \eta_2$:

$$\xi_1 = \min(|\cos \varphi|, |\sin \varphi|), \quad \eta_1 = \max(|\cos \varphi|, |\sin \varphi|),$$

$$\xi_2 = \min(C \cdot |\cos \varphi|, |\sin \varphi|), \quad \eta_2 = \max(C \cdot |\cos \varphi|, |\sin \varphi|),$$

Затем вычислим p_1 — расстояние от центра ячейки до интерфейса:

$$p_1 = \begin{cases} (\alpha - \frac{1}{2}) \cdot \eta_1, & |2\alpha - 1| \leq 1 - \frac{\xi_1}{\eta_1}, \\ \operatorname{sgn}(\alpha - \frac{1}{2}) \cdot \left(\frac{\xi_1 + \eta_1}{2} - \sqrt{(1 - |2\alpha - 1|) \xi_1 \eta_1} \right), & |2\alpha - 1| > 1 - \frac{\xi_1}{\eta_1}. \end{cases}$$

Далее p_2 — расстояние от центра прямоугольника, который перетекает в соседнюю ячейку до интерфейса. Если рассматривается единичный квадрат $[0, 1]^2$ и считается поток через правую сторону, то этот прямоугольник $[1 - C, 1] \times [0, 1]$, обозначен пунктиром на Рис. 4.3.

$$p_2 = p_1 + \frac{1}{2} \cdot (C - 1) \cdot \cos \varphi.$$

В итоге, объемная доля отсечения от этого прямоугольника:

$$\alpha_\sigma^* = \begin{cases} \frac{1}{2} + \frac{p_2}{\eta_2}, & |p_2| \leq \frac{\eta_2 - \xi_2}{2}, \\ H(p_2) - \frac{\operatorname{sgn}(p_2)}{2\xi_2 \eta_2} \cdot \left(|p_2| - \frac{\xi_2 + \eta_2}{2} \right)^2, & \frac{\eta_2 - \xi_2}{2} < |p_2| < \frac{\xi_2 + \eta_2}{2}, \\ H(p_2), & \frac{\xi_2 + \eta_2}{2} \leq |p_2|. \end{cases}$$

Объемную долю α_σ^* уже следует использовать в расчетах для задачи переноса.

Интересная задача: при заданных сечениях на ребрах квадрата, оценить объемную долю в самой квадратной ячейке (Рис. 4.5). Важно ещё, чтобы решение для прямой возвращало точный результат. Общее решение предложил Лёша, нужно каким-то образом составить пятиугольник из векторов. Треугольник это считай вырожденный пятиугольник с нулевой стороной. Я покрутил квадраты, итоговая формула получилась следующая:

$$\begin{aligned} \alpha = \frac{1}{2} & \left[\min(\alpha_L, \alpha_R) \cdot \max(\alpha_B, \alpha_T) + \max(\alpha_L, \alpha_R) \cdot \min(\alpha_B, \alpha_T) + \right. \\ & \left. + \max(\alpha_L, \alpha_R) \cdot \max(\alpha_B, \alpha_T) - \min(\alpha_L, \alpha_R) \cdot \min(\alpha_B, \alpha_T) \right]. \end{aligned}$$

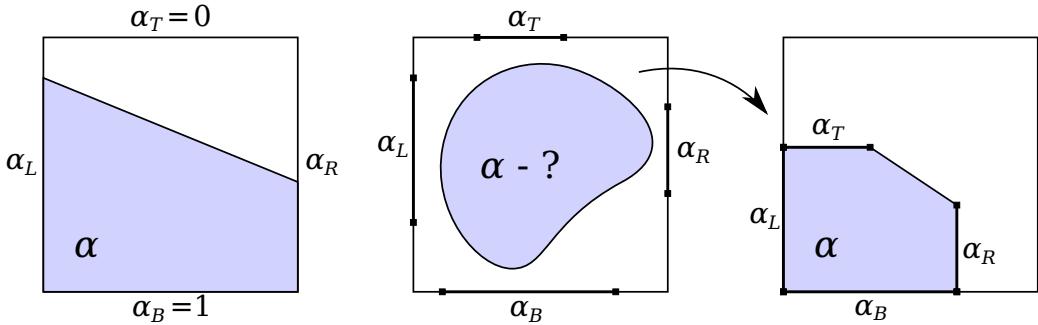


Рис. 4.5: Восстановление объемной доли в квадрате, по долям на ребрах.

4.1.2 Сечения кубоидов

- Сечение единичного куба. Нормаль упорядочена, $|n_x| \leq |n_y| \leq |n_z|$.

4.2 Специальные функции

Мне надоело каждый раз сочинять одни и те же часто используемые функции. Надо записать. Далее функция Хевисайда $\eta(x)$ доопределена нулем в нуле (!), функция знака $\text{sgn}(x)$. Получается, не связана с sgn .

Гладкая функция Хевисайда

Гладкая функция $f(x)$ определена при значениях $x > 0$. Определим для значений $x \geq 0$ функцию $\hat{f}(x)$ следующим образом: $\hat{f}(0) = 0$ и $\hat{f}(x) \equiv f(x)$ при $x > 0$. Если $\eta(x)$ — функция Хевисайда, которая в точке $x = 0$ принимает значение 0, тогда функцию $\hat{f}(x)$ можно записать как $\hat{f}(x) = \eta(x)f(x)$ ¹. При этом, если $\lim_{x \rightarrow 0} f(x) \neq 0$, тогда новая функция $\hat{f}(x)$ имеет скачок в точке $x = 0$. Собственно, если имеется функция $f(x)$, которую необходимо доопределить новым значением в точке $x = 0$, но при этом хочется это сделать «гладко», без скачков, то можно воспользоваться гладкой функцией Хевисайда $\eta_s(x)$ (smooth), работаем с ней аналогично $\hat{f}(x) = \eta_s(x)f(x)$.

Что мы будем называть гладкой функцией Хевисайда $\eta_s(x)$? Введем два параметра: x_0 — смещение функции Хевисайда, $w > 0$ — ширина. Функция $\eta_s(x) = 0$ при $x \leq x_0$, функция $\eta(x) = 1$ при $x \geq x_0 + w$. На интервале $x \in [x_0, x_0 + w]$ функция изменяется непрерывно. Очевидно, при уменьшении ширины $w \rightarrow 0$ гладкая функция Хевисайда стремится к обычной $\eta(x)$. Будем в общем случае писать как $\eta_s(x)$ (smooth), подразумевая, что в функции есть еще пара параметров (x_0, w) . Хотя в простейшем случае можно полагать, что $x_0 = 0$ и $w = 1$.

¹Фактически, такое соглашение использует Горюнов при работе с обобщенными функциями в области $x \geq 0$. Такое определение $\eta(x)$ позволяет занулять значение функции в нуле, а также брать обобщенную производную и выполнять преобразование Лапласа

Почему-то первой в голову пришел вариант гладкой функции с синусом. Вероятно, потому что изначально я строил сигмоиды, которые являются нечетными функциями. Обозначим функцию как $\eta_{sin}(x)$:

$$\eta_{sin}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_0, \\ \sin \frac{\pi(x - x_0)}{2w}, & x \in (x_0, x_0 + w), \\ 1, & x \geq x_0 + w. \end{cases} \quad (4.4)$$

$$\eta_{sin}(x) = \eta(\xi) \cdot \left(1 + \eta(1 - \xi) \cdot \left(\sin \frac{\pi\xi}{2} - 1 \right) \right), \quad \xi = \frac{x - x_0}{w}.$$

Равна нулю при $x \leq x_0$, выходит на единицу на отрезке $[x_0, x_0 + w]$. Функция гладкая в точке $x = x_0 + w$. Второй вариант записи удобен при векторизации в python. Производная в x_0 :

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \eta'_{sn}(x) = \frac{\pi}{2w}.$$

Зачем использовать синус, он ведь долго считается. Можно использовать полином (polynomial). Самое простое — квадратичный. Обозначим как $\eta_{p2}(x)$:

$$\eta_{p2}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_0, \\ \xi \cdot (2 - \xi), & x \in (x_0, x_0 + w), \\ 1, & x \geq x_0 + w. \end{cases}$$

Функция $\eta_{p2}(x)$ гладкая в точке $x = x_0 + w$. Потом выяснил, что эту функцию легко обобщить. Можно выбрать не квадратичный полином, а полином степени n . Обозначим как функцию $\eta_{pn}(x)$:

$$\eta_{pn}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_0, \\ 1 - (1 - \xi)^n, & x \in (x_0, x_0 + w), \\ 1, & x \geq x_0 + w. \end{cases} \quad (4.5)$$

$$\eta_{pn}(x) = \eta(\xi) \cdot (1 - \eta(1 - \xi) \cdot (1 - \xi)^n), \quad \xi = \frac{x - x_0}{w}.$$

Функция $\eta_{pn}(x)$ в точке $x = x_0 + w$ имеет $n - 1$ производную равную нулю, то есть у неё высокая степень гладкости при $x > 0$. Производная в нуле для полиномиальных Хевисайдов зависит от степени n :

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \eta'_{pn}(x) = \frac{n}{w},$$

это позволяет регулировать наклон в точке $x = x_0$.

Если полиномиальная функция всё равно недостаточно резкая, то можно использовать

функцию с бесконечной производной в x_0 . Простейший способ сконструировать такую функцию это использовать извлечение корня. Обозначим класс функций $\eta_{rn}(x)$ (rational):

$$\eta_{rn}(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_0, \\ \frac{1}{n} \sqrt[n]{\xi} \cdot (n+1-\xi), & x \in (x_0, x_0+w), \\ 1, & x \geq x_0+w. \end{cases} \quad (4.6)$$

$$\eta_{rn}(x) = \eta(\xi) \cdot \left(1 + \eta(1-\xi) \cdot \left(\frac{1}{n} \sqrt[n]{|\xi|} \cdot (n+1-\xi) - 1 \right) \right), \quad \xi = \frac{x-x_0}{w}.$$

Функция $\eta_{rn}(x)$ является гладкой в точке сшивки $x = x_0 + w$. Хотя производная в точке $x = x_0$, показатель корня n влияет на резкость функции. При $n \rightarrow \infty$ функция стремится к обычному Хевисайду. На практике, чтобы не тратить много вычислительных ресурсов, следует использовать квадратный или кубический корень.

Гладкая функция знака/сигмоиды

Меня не устраивают классические функции-сигмоиды, поскольку они выходят на значения -1 и 1 только асимптотически. Мне нужны функции, которые достигают значения 1 по модулю при выходе за установленные рамки.

Что будем называть гладкой функцией знака? Нечетная функция относительно точки $x = x_0$, при значениях $|x - x_0| \geq w$ принимает значение по модулю равное единице. Желательно гладкая. Гладкую функцию знака с таким определением можно ввести через определенные ранее гладкие функции Хевисайда $\eta_s(x)$. Если $x_0 = 0$, тогда определим гладкую функцию знака $\text{sgn}_s(x)$ как $\text{sgn}_s(x) = \text{sgn}(x)\eta_s(|x|)$. Внимание, следует помнить, что между гладкими версиями **не работает** связь $\text{sgn}(x) + 1 = 2\eta(x)$.

Сигмоида с синусом:

$$\text{sgn}_{sin}(x) = \begin{cases} -1, & x \leq x_0 - w, \\ \sin \frac{\pi(x-x_0)}{2w}, & |x-x_0| \leq w, \\ +1, & x \geq x_0 + w. \end{cases} \quad (4.7)$$

$$\text{sgn}_{sin}(x) = \eta_{\frac{1}{2}}(|\xi| - 1) \cdot \text{sgn}(\xi) + \eta_{\frac{1}{2}}(1 - |\xi|) \cdot \sin \frac{\pi\xi}{2}, \quad \xi = \frac{x-x_0}{w}.$$

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \eta'_{sn}(x) = \frac{\pi}{2w}.$$

Полиномиальная сигмоида:

$$\operatorname{sgn}_{pn}(x) = \operatorname{sgn}(x - x_0) \cdot \begin{cases} 1 - (1 - |\xi|)^n, & |x - x_0| < w, \\ 1, & |x - x_0| \geq w. \end{cases} \quad (4.8)$$

$$\operatorname{sgn}_{pn}(x) = \operatorname{sgn}(\xi) \cdot (1 - \eta(1 - |\xi|) \cdot (1 - |\xi|)^n), \quad \xi = \frac{x - x_0}{w}.$$

Функция $\operatorname{sgn}_{pn}(x)$ в точках $x = x_0 \pm w$ имеет $n - 1$ производную равную нулю, то есть у неё высокая степень гладкости в точках $x \neq x_0$. Производная в $x = x_0$ для полиномиальной функции знака зависит от степени n , что позволяет регулировать наклон:

$$\lim_{x \rightarrow x_0} \operatorname{sgn}'_{pn}(x) = \frac{n}{w}.$$

Сигмоида с корнем:

$$\operatorname{sgn}_{rn}(x) = \operatorname{sgn}(x - x_0) \cdot \begin{cases} \frac{1}{n} \sqrt[n]{|\xi|} \cdot (n + 1 - |\xi|), & |x - x_0| < w, \\ 1, & |x - x_0| \geq w. \end{cases} \quad (4.9)$$

$$\operatorname{sgn}_{rn}(x) = \operatorname{sgn}(\xi) \cdot \left(1 + \eta(1 - |\xi|) \cdot \left(\frac{1}{n} \sqrt[n]{|\xi|} \cdot (n + 1 - |\xi|) - 1 \right) \right), \quad \xi = \frac{x - x_0}{w}.$$

Функция $\operatorname{sgn}_{rn}(x)$ является гладкой в точках сшивки $x = x_0 \pm w$. Показатель корня n влияет на резкость функции, при $n \rightarrow \infty$ функция стремится к обычной функции знака. На практике, для оптимизации вычислений, следует использовать квадратный или кубический корень.

Глава 5

Приложения

5.1 Выкладки

5.1.1 Двучленное уравнение состояния и Stiffened Gas

Стартуем с формулы

$$P(\rho, e) = (\gamma - 1)\rho e + c_0^2(\rho - \rho_0) \quad (5.1)$$

Хотим найти термическое уравнение состояния $P(\rho, T)$. Просто так его из $P(\rho, e)$ не вывести, требуется хотя бы некоторое допущение. Используем следующее, предполагаем, что $\left(\frac{\partial e}{\partial T}\right)_\rho = c_v = \text{const}$, тогда внутренняя энергия представляется в форме

$$e(\rho, T) = c_v T + K(\rho), \quad (5.2)$$

Попробуем найти каноническое уравнение состояния $e(\rho, s)$.

$$\left(\frac{\partial e}{\partial s}\right)_\rho = T = \frac{e(\rho, s) - K(\rho)}{c_v}, \quad (5.3)$$

это что-то вроде ОДУ на $e(\rho, s)$, общее решение имеет вид

$$e(\rho, s) = A(\rho) \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) + K(\rho). \quad (5.4)$$

Также известно

$$\left(\frac{\partial e}{\partial \rho}\right)_s = \frac{P}{\rho^2}. \quad (5.5)$$

Тут уже ОДУ которое должно выполняться тождественно $\forall s$:

$$\rho^2 \left[A'(\rho) \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) + K'(\rho) \right] = P = (\gamma - 1)\rho \left[A(\rho) \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) + K(\rho) \right] + c_0^2(\rho - \rho_0) \quad (5.6)$$

Отсюда можно вычислить $A(\rho)$ и $K(\rho)$, а значит и $e(\rho, s)$. Решение содержит только две константы e_1 и e_2 .

$$A(\rho) = e_1 \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1}, \quad K(\rho) = e_2 \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1} + \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma \rho} - \frac{c_0^2}{\gamma - 1}, \quad (5.7)$$

$$e(\rho, s) = \left[e_1 \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) + e_2 \right] \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1} + \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma \rho} - \frac{c_0^2}{\gamma - 1}. \quad (5.8)$$

Константа e_1 перед экспонентой никак не влияет на формулу для давления. Теперь есть два варианта. 1 это волевым решением положить $e_2 = 0$. Пурурум, получится Stiffened Gas.

$$e(\rho, s) = A \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) \rho^{\gamma-1} + \frac{P_0}{\rho} + e_0. \quad (5.9)$$

Второй вариант. Выпишем давление:

$$\begin{aligned} P = (\gamma - 1)\rho(c_v T + K(\rho)) + c_0^2(\rho - \rho_0) &= (\gamma - 1)\rho \left[c_v T + e_2 \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1} + \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma \rho} - \frac{c_0^2}{\gamma - 1} \right] + \\ &+ c_0^2(\rho - \rho_0) = (\gamma - 1)c_v \rho T + (\gamma - 1)\rho_0 e_2 \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1} - \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma} = \\ &= (\gamma - 1)c_v \rho T + \frac{\rho_0 c_0^2}{\gamma} \left[\frac{\gamma(\gamma - 1)e_2}{c_0^2} \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1} - 1 \right]. \end{aligned}$$

Вторую скобку будем называть «упругой частью» давления. Будем выбирать параметр e_0 таким образом, чтобы упругая часть давления обращалась в ноль при $\rho = \rho_0$, то есть

$$e_2 = \frac{c_0^2}{\gamma(\gamma - 1)} = -\frac{e_0}{\gamma}. \quad (5.10)$$

Второй вариант канонического уравнения состояния:

$$e(\rho, s) = \left[A \exp\left(\frac{s}{c_v}\right) - \frac{e_0}{\gamma} \right] \left(\frac{\rho}{\rho_0}\right)^{\gamma-1} + \frac{P_0}{\rho} + e_0. \quad (5.11)$$

Параметр A ни на что не влияет. Пофиг.

5.1.2 Ми – Грюнайзена и Мурнагана

Будем следовать статье [?] при выводе общей формы уравнения Ми – Грюнайзена. В начале 20-го века Ми и Грюнайзен разрабатывали теорию твердых материалов, в которой давление линейная функция энергии. Общее наименование Ми – Грюнайзена относится к моделям, которые следуют этому допущению. Коэффициент пропорциональности $\Gamma(\rho)$, который связывает энергию и давление называется параметром Грюнайзена.

При исследовании кристаллов они получили, что внутренняя энергия кристаллов складывается из их потенциальной энергии при нулевой температуре (потенциал взаимодействия атомов при нулевой температуре), а также из температурной энергии вибраций, которая расстет с температурой

$$e(\rho, T) = e_{ref}(\rho) + e_T(\rho, T), \quad (5.12)$$

Аналогичное разложение используется для давления:

$$P(\rho, T) = P_{ref}(\rho) + P_T(\rho, T), \quad (5.13)$$

Потенциальная энергия $e_{ref}(\rho)$ также называется холодной энергией или референсным потенциалом, $P_{ref}(\rho)$ — холодное или референсное давление. Они связаны соотношением

$$P_{ref}(\rho) = \rho^2 e'_{ref}(\rho). \quad (5.14)$$

Референсные кривые при нулевой температуре получаются математически при анализе кристаллических решеток, к примеру, простые формулы приводятся здесь [?]. Правда математика и теоретическая физика дают очень грубые оценки для констант в уравнениях, так что их потом подбирают в экспериментах. Ну хотя бы вид функций известен.

Температурное давление $P_T(\rho, T)$ пропорционально энергии $e_T(\rho, T)$. Их соотношение не зависит от температуры, а только от вибрационной частоты ν и плотности ρ . Параметр Грюнайзена Γ можно ввести как

$$\Gamma(\rho) = \frac{d \ln \nu}{d \ln \rho}.$$

Исходя из *virial theorem* Грюнайзен получил

$$P(\rho, e) - P_{ref}(\rho) = \Gamma(\rho) \rho [e - e_{ref}(\rho)]. \quad (5.15)$$

Что ещё интересного вводится в статье. Ну во первых предположим, что $c_v = (de/dT)_\rho = \text{const}$, как часто делаем. Вот есть формула температуры Дебая

$$T_{ref}(\rho) = T_0 \cdot \exp \left[\int_{\rho_0}^{\rho} \frac{\Gamma(\rho)}{\rho} d\rho \right], \quad (5.16)$$

которую будем использовать в качестве референсной кривой. И известно, свойство, указано в статье [?].

$$e - e_{ref}(\rho) = T_{ref}(\rho) [\sigma(s) - \sigma(s_0)], \quad (5.17)$$

где $\sigma(s)$ — энтропийная функция.

Откуда берется уравнение состояния из основного раздела? Для референсной кривой вы-

бирается закон Мурнагана.

$$P_{ref}(\rho) = \frac{B}{n} \left[\left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^n - 1 \right]. \quad (5.18)$$

Для референсной температуры есть две опции, если предположить $\Gamma = \text{const}$, тогда интегрирование даст

$$T_{ref}(\rho) = T_0 \left(\frac{\rho}{\rho_0} \right)^\Gamma, \quad (5.19)$$

ну то есть как для двучленного уравнения состояния ($\Gamma = \gamma - 1$). Может также предположить, в [?] написано, что это стандартное предположение для металлов, что $\Gamma(\rho)\rho = \Gamma\rho_0 = \text{const}$. Тогда после интегрирования получим

$$T_{ref}(\rho) = T_0 \exp \left[\Gamma \left(1 - \frac{\rho_0}{\rho} \right) \right], \quad (5.20)$$

действительно, такая версия встречается, к примеру, у Уолша и Кристиана [?]. Во видимому, если выбирать эту версию, то и в основном уравнении следует заменить ρ на ρ_0 . Последний произвол остался в выборе энтропийной функции. Ну тут выбираем как обычно, откуда это следует, я пока не разобрался. Кажется из того что $c_v = \text{const}$

$$\sigma(s) = \exp \left(\frac{s-s_0}{c_v} \right). \quad (5.21)$$

Тогда каноническое уравнение состояния:

$$e = e_{ref}(\rho) + c_v T_{ref}(\rho) \left(\exp \left(\frac{s-s_0}{c_v} \right) - 1 \right). \quad (5.22)$$