

МНОГОФАЗНОЕ ПОЛУЭМПИРИЧЕСКОЕ ШИРОКОДИАПАЗОННОЕ УРАВНЕНИЕ СОСТОЯНИЯ ЖЕЛЕЗА

И. Н. Арапов, А. А. Каякин, А. С. Данилов, Д. Г. Гордеев

ФГУП «РФЯЦ – ВНИИЭФ», Саров, Россия

Описана модель, позволяющая создавать многофазные уравнения состояния различных материалов путем «сшивки» отдельных (локальных) уравнений состояния его фаз. Сшивка может производиться как в равновесном приближении, так и с учетом межфазной кинетики при переходе от одной фазы твердого тела к другой.

Эффективность модели проверена на примере разработки уравнения состояния железа, поскольку это вещество хорошо исследовано, в том числе в области фазовых переходов в твердом теле. Для описания термодинамических свойств железа было разработано два локальных уравнения состояния. Первое описывает α -фазу твердого тела, а второе – ϵ -фазу твердого тела, фазы жидкости и пара. Для описания сшиваемых фаз, применялась модель РОСА-МФИ [1, 2]. Показано, что в случае использования, разработанного многофазного уравнения состояния, улучшается точность описания экспериментальных данных в области α - ϵ фазового перехода. На рисунках, представленных в докладе, приводится сравнение расчетов по разработанному УРС с экспериментальными данными и расчетами по другим моделям.

Литература

1. **Арапов, И. Н.** Полуэмпирическое широкодиапазонное уравнение состояния меди в форме модели РОСА-МФИ [Текст] / И. Н. Арапов, А. А. Каякин, А. С. Данилов, Д. Г. Гордеев, Л. Ф. Гударенко // Международная конференция «XVI Забабахинские научные чтения»: сб. тез. докл. – 2023. – С. 147.
 2. **Данилов, А. С.** Алгоритмы и особенности программной реализации в пакете программ «УРС-ОФ» полуэмпирической модели широкодиапазонных уравнений состояния «РОСА-МФИ» [Текст] / А. С. Данилов, Д. Г. Гордеев, О. Н. Шумилина, И. Н. Арапов // ВАНТ. Сер. «Математическое моделирование физических процессов». – 2024. – Вып. 1. – С. 64–77.
-