

Міністерство освіти і науки України  
Донецький національний технічний університет

Кафедра "Вища математика"

**Збірник науково-методичних робіт**

Випуск 4

Донецьк -2006

УДК 5:371.214.114, 621.923, 517.95(09), 531.18, 915.77.54, 531.38, 517.9,  
517, 518, 531, 517.8, 539.5, 517.926.

Рекомендовано до друку Радою Донецького Національного технічного  
Університету

Протокол № 9 від 22.12. 2006 р.

**Збірник науково-методичних робіт.** - Вип. 4. - Донецьк: ДонНТУ, 2006. -167с.

В збірнику представлено різні напрямки застосування математичних методів до розв'язання інженерних задач, а саме, задач механіки твердого тіла, фізики магнітних явищ, статистичної фізики та інших.

Науково-методичні роботи є узагальненням досвіду викладачів кафедри по удосконалюванню математичної підготовки спеціалістів.

Видання розраховано на широке коло наукових робітників, а також аспірантів та студентів старших курсів університетів.

**Редакційна колегія:** проф. Улітін Г.М. - редактор, проф. Тю Н.С., проф. Лесіна М.Ю, проф. Косолапов Ю.Ф., доц. Мироненко Л.П., ст. викл. Локтіонов І.К. (ДонНТУ).

Адреса редакційної колегії : Україна, 83050, м. Донецьк, вул. Артема, 96, ДонНТУ, 3-й учбовий корпус, кафедра "Вища математика", тел. (062) 3010901.

**Верификация расчетов плотностей фаз модели простой жидкости***Локтионов И.К., Гусар Г.А.**Донецкий национальный технический университет*

Настоящая работа продолжает цикл работ [1-4] посвященных разработке и применению методов расчета термодинамических свойств газов и жидкостей. Здесь, как и в [1], эксплуатируется потенциал взаимодействия, удобный в математическом смысле и наделенный характерными свойствами межатомных потенциалов, используемых для расчетов термодинамических свойств веществ. Этот потенциал и его Фурье-образ (в трехмерном случае) имеют вид

$$v(r) = \frac{\exp(-ar)}{4\pi} \left( \frac{A}{r} - \frac{B}{2a} \right), \quad \tilde{v}(k) = \frac{A}{k^2 + a^2} - \frac{B}{(k^2 + a^2)^2} \quad (1)$$

где  $a, A, B$  - параметры потенциала взаимодействия, удовлетворяющие условиям  $B/Aa^2 < 1$ , ( $A > 0, B > 0$ ), обеспечивающим его «реальность».

Параметры  $A, a, B$  могут быть определены из условий совпадения аппроксимирующего потенциала с «реальным», например, потенциалом Ленарда-Джонса в некоторых точках. В качестве таких условий согласования потенциала (1) с потенциалом Ленарда-Джонса (6-12) можно принять три уравнения

$$V(\sigma) = 0, \quad V(r_m) = -V_m, \quad (dV/dr)_{r=r_m} = 0,$$

где  $\sigma, r_m, V_m$  - нуль и точка минимума и минимум потенциала (6-12) соответственно. Указанная аппроксимация дает следующие выражения параметров потенциала

$$a = \frac{\sigma}{r_m(r_m - \sigma)}, \quad A = \frac{4\pi \cdot r_m \sigma}{r_m - \sigma} V_m \exp(ar_m), \quad B = \frac{2Aa}{\sigma}, \quad \varepsilon = \frac{2r_m(r_m - \sigma)}{\sigma^2}.$$

и их значения для аргона  $a = 2,136 \cdot 10^{10} (\text{м}^{-1})$ ,  $A = 2,282 \cdot 10^{-25} (\text{Дж}/\text{м})$ ,  $B = 2,862 \cdot 10^{-5} (\text{Дж}/\text{м}^3)$ .

В [1] установлено, что для согласия с результатами измерений уравнение состояния модельной системы должно содержать некоторые параметры  $\xi, \gamma, \Delta$ , значения которых определяются по критической точке. Для аргона значения параметров найдены численными методами составляют  $\xi = 0,1634$ ,  $\gamma = 0,002188$ ,  $\Delta = 6,6658 \cdot 10^{-4}$ .

Среди прочих, практический интерес представляет задача вычисления плотностей сосуществующих фаз, с помощью которых можно построить кривую насыщения.

Расчет плотностей сосуществующих фаз основан на равенстве давлений и химических потенциалов фаз при заданной температуре

$$\{P(n_\Gamma, T) = P(n_{жс}, T), \quad \mu(n_\Gamma, T) = \mu(n_{жс}, T)\}. \quad (2)$$

Уравнение состояния и химический потенциал определяется стандартными методами термодинамики с помощью свободной энергии [2]

$$F = -k_b T \ln Z = F_{id} - \frac{N}{2}(v_0 - n\tilde{v}_0) + \frac{k_b T V}{2} \int_{\Omega} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \ln(1 + n\beta\tilde{v}(k)), \quad (3)$$

$$P = \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = P_{id} + \gamma \frac{n^2 \tilde{v}_0}{2} - \xi \frac{k_b T}{2} \int_{\Omega} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[ \ln(1 + \Delta n \beta \tilde{v}(k)) - \frac{\Delta n \beta \tilde{v}(k)}{1 + \Delta n \beta \tilde{v}(k)} \right], \quad (4)$$

$$\mu(n, T) = \left( \frac{\partial F}{\partial N} \right)_{T, V} = \frac{1}{\beta} \ln(n\lambda^3) + \gamma \tilde{v}_0 - \frac{\Delta \xi v_0}{2} + \frac{\xi}{2\beta} \int_{\Omega} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[ \frac{\Delta \beta \tilde{v}(k)}{1 + \Delta \beta \tilde{v}(k)} \right], \quad (5)$$

где  $k_b$  - постоянная Больцмана,  $k_b \ln(n\lambda^3)$  - хим. потенциал идеального газа,  $\lambda$  - тепловая длина волны де Бройля,  $n = N/V$  - плотность,  $v_0 = v(0)$ ,  $\tilde{v}_0 = \tilde{v}(0)$  - потенциал и его Фурье-образ при  $r = 0, k = 0$  соответственно,  $\beta = 1/k_b T$ .

Интегрирование (3) с фурье-образом потенциала (1) приводит к модифицированному уравнению состояния

$$P = k_b n T + \gamma \frac{n^2 w}{2} d - \xi \frac{k_b T a^3}{12\pi} \left[ 2 + \left( \frac{\Delta n \beta w}{2} - 1 \right) Q - \frac{\Delta n \beta w (2 + q - d)}{2Q} \right] \quad (6)$$

где  $w = A/a^2$ ,  $Q = \sqrt{2 + \Delta n \beta w + 2q}$ ,  $q = \sqrt{1 + \Delta n \beta w d}$ ,  $d = 1 - \varepsilon$ ,  $\varepsilon = B/Aa^2$ .

Учитывая, что частицы взаимодействуют посредством потенциала (1) химический потенциал имеет вид

$$\mu(n, T) = k_b T \ln(n\lambda^3) + \gamma \tilde{v}(0) + \frac{\xi \Delta}{8\pi} \left[ Aa + \frac{B}{2a} + \frac{D}{p} + \frac{Q}{r} \right],$$

где  $D = \frac{N - Mp^2}{r^2 - p^2}$ ,  $Q = \frac{Mr^2 - N}{r^2 - p^2}$ ,  $M = (Aa^2 - B) - A(2a^2 + \Delta n \beta A)$ ,

$$N = -A(a^4 + \Delta n \beta (Aa^2 - B)), \quad p^2 = \frac{1}{2} \left( 2a^2 + \Delta n \beta A + \sqrt{(\Delta n \beta A)^2 + 4\Delta n \beta B} \right),$$

$$r^2 = \frac{1}{2} \left( 2a^2 + \Delta n \beta A - \sqrt{(\Delta n \beta A)^2 + 4\Delta n \beta B} \right).$$

Очевидно, что система (2) весьма громоздка даже для более простых межатомных потенциалов и не поддается точному решению. Поэтому система

решается методами теории возмущений. При этом в качестве малого параметра может быть выбрана приведенная температура  $\theta = (T - T_c)/T_c$ . В общем виде (исключая некоторые условия, которым должен удовлетворять потенциал) решение системы (2) представлено в работах [3,4]. Плотности сосуществующих фаз были получены в виде разложений по степеням  $\sqrt{-\theta}$  в окрестности критической точки до третьего порядка включительно

$$n_T(\theta) \approx n_c - A_0(-\theta)^{1/2} + B_0\theta + A_1(-\theta)^{3/2}, \quad (7)$$

$$n_{жс}(\theta) \approx n_c + A_0(-\theta)^{1/2} + B_0\theta - A_1(-\theta)^{3/2}, \quad (8)$$

где  $A_0 = \sqrt{a_1/a_2}$ ,  $B_0 = \frac{a_1 a_2 (a_8 - b_8) - a_1^2 (a_{12} - b_{12})}{-a_1 a_2 (a_6 - b_6) - a_2^2 (a_4 - b_4)}$ ,

$$A_1 = \frac{1}{8A_0 a_2} \{a_3 B_0^2 + a_4 B_0 + a_5 - 4A_0^2 (a_6 B_0 + a_8) + 16a_{12} A_0^4\},$$

$$a_1 = 6(1 + \xi n_c I_2 / 2 - \xi n_c^2 I_3), \quad a_2 = \xi I_3 / 2 - 3\xi n_c I_4 / 4,$$

$$a_4 = 6\xi(I_2 / 2 - 3n_c I_3 + 3n_c^2 I_4), \quad b_4 = 6(-1/n_c - 2\xi n_c I_3 + 3\xi n_c^2 I_4),$$

$$a_6 = \xi(-9I_4 / 4 + 3n_c I_5), \quad b_6 = -3/2n_c^3 + 3\xi n_c I_5,$$

$$a_8 = \xi(-I_3 + 15n_c I_4 / 4 - 3n_c^2 I_5), \quad b_8 = 1/2n_c^2 + 9\xi n_c I_4 / 4 - 3\xi n_c^2 I_5,$$

$$a_{12} = \frac{\xi}{20} \left( 3I_5 - \frac{15}{4} n_c I_6 \right), \quad b_{12} = \frac{1}{20} \left( \frac{3}{2n_c^4} - \frac{15}{4} \xi n_c I_6 \right),$$

Интегралы  $I_l = \int_{\Omega^+} \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \left[ \frac{\Delta\beta_c \tilde{v}(k)}{1 + \Delta n_c \beta_c \tilde{v}(k)} \right]^l$  легко вычисляются с помощью

рекуррентного соотношения  $I_{l+1} = -\frac{1}{l} \left( \frac{\partial I_l}{\partial n_c} \right)$ . Отметим, между прочим, что

интегралы  $I_2$  и  $I_3$  имеют универсальную форму, т.е. определяются из решения системы для критической точки раз и навсегда

$$\begin{cases} (\partial P / \partial n)_T = 1 + \gamma n_c \beta_c \tilde{v}(0) - \xi n_c I_2 / 2 = 0, \\ (\partial^2 P / \partial n^2)_T = \gamma n_c \tilde{v}(0) - \xi I_2 / 2 + \xi n_c I_3 = 0 \end{cases} \quad (9)$$

Из (5) следует, что  $I_2 = 2(1 + \gamma n_c \beta_c \tilde{v}(0)) / \xi n_c$  и  $I_3 = 1 / \xi n_c^2$  и вычисляются, если известны критические параметры вещества, они не зависят от вида потенциала взаимодействия, а только от значения Фурье-образа в нуле.

Непосредственное вычисление интеграла  $I_2$  не встречает принципиальных трудностей. Подставляя  $\tilde{v}(k)$  в подынтегральное выражение, получим

сходящийся (подынтегральная функция  $\propto 1/k^2$ ) несобственный интеграл первого рода

$$I_2 = \frac{(\Delta\beta_c)^2}{2\pi^2} \int_0^{+\infty} dk \left[ \frac{Ak^3 + (Aa^2 - B)k}{k^4 + (2a^2 + \Delta n_c \beta_c A)k^2 + a^4 + \Delta n_c \beta_c (Aa^2 - B)} \right]^2.$$

Процедура вычисления подобных интегралов хорошо известна, поэтому здесь приводится лишь окончательный результат

$$I_2 = \frac{(\Delta\beta_c)^2}{4\pi} \left[ \frac{N_1}{2p^3} + \frac{Q_1}{2r^3} + \frac{N_2}{p} + \frac{Q_2}{r} \right],$$

$$N_1 = -p^2 \left( \frac{Ap^2 - (Aa^2 - B)}{p^2 - r^2} \right)^2, \quad Q_1 = -r^2 \left( \frac{Ar^2 - (Aa^2 - B)}{p^2 - r^2} \right)^2,$$

$$N_2 = \frac{A^2 p^4 (p^4 - 4p^2 r^2 + 3r^4) - (Aa^2 d)^2 (p^4 - r^4) + 4(Aa^2) dp^2 r^2 (p^2 - r^2)}{(p^2 - r^2)^4},$$

$$Q_2 = \frac{A^2 r^4 (r^4 - 4p^2 r^2 + 3p^4) - (Aa^2 d)^2 (p^4 - r^4) - 4(Aa^2) dp^2 r^2 (p^2 - r^2)}{(p^2 - r^2)^4},$$

или после упрощений

$$I_2 = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{\Delta\beta_c A}{p^2 - r^2} \right) \left[ \frac{(p^2 - a^2 d)^2}{4p} + \frac{(p^2 - a^2 d)(a^2 d - r^2)}{p + r} + \frac{(a^2 d - r^2)^2}{4r} \right],$$

где  $d = 1 - B/Aa^2$ .

Интегралы  $I_3 - I_6$  входящие в коэффициенты разложений (7), (8) определяются с помощью рекуррентной формулы. Из-за громоздкости выражения  $I_3 - I_6$  не приводятся. Используя полученные результаты, можно выполнить интересующий нас расчет плотностей сосуществующих фаз. Результаты расчета плотностей рассматриваемой модели представлены в таблице, которая содержит также соответствующие экспериментальные значения плотностей и давлений.

$T, K$	$\rho_\Gamma, \frac{кг}{м^3}$	$\rho_{ж}, \frac{кг}{м^3}$	$P(\rho_\Gamma, T), МПа$	$P(\rho_{ж}, T), МПа$	$P_{эксп}, МПа$
150	392,269 <b>396,039</b>	697,581 <b>683,060</b>	4,671	4,681	4,739
148	281,542 <b>308,642</b>	892,590 <b>773,395</b>	4,108	4,046	4,383

146	228,082 <b>260,213</b>	1030 <b>829,876</b>	3,650	3,402	4,050
-----	---------------------------	------------------------	-------	-------	-------

Жирным шрифтом в таблице выделены экспериментальные значения плотностей сосуществующих фаз.

Можно ожидать, что учёт в разложении  $n_{\Gamma}$  и  $n_{\text{жс}}$  слагаемых более высокого порядка малости, чем  $(-\theta)^{3/2}$  приведёт к более точным значениям  $n_{\Gamma}$  и  $n_{\text{жс}}$ .

Главное достижение этой работы, как и [1], состоит в том, что в ней получены аналитические (хотя и приближенные) выражения для  $n_{\Gamma}$  и  $n_{\text{жс}}$  и выполнено сравнение теоретических значений с экспериментальными.

В заключение следует отметить, что адекватное описание результатов измерений стало возможным благодаря введению в свободную энергию [1] подгоночных параметров  $\xi, \gamma, \Delta$ , происхождение которых объяснить пока не представляется возможным. Если этими параметрами пренебречь, то может быть получено только качественное представление о кривой сосуществующих фаз, а количественное сопоставление с экспериментальными данными оказывается чрезвычайно неудовлетворительным.

### *Литература*

1. Локтионов И.К., Тю Н.С. Исследование изобарной теплоемкости модельной системы.- в Сб. научно-методических работ, каф. «ВМ», выпуск 3, 2005, ДонНТУ, С. 95-101.
2. Захаров А.Ю., Локтионов И.К. Классическая статистика одно-компонентных систем с модельными потенциалами // ТМФ, 1999, Т. 119, № 1, С. 167-176.
3. Захаров А.Ю., Локтионов И.К., Терехов С.В. Метод факторизации в задачах классической статистической механики. Расчет бинадали и спинодали непрерывных однокомпонентных систем в окрестности критической точки / Донец. гос. техн. ун-т – г. Донецк, 1994. – 11 с. ил. Библиогр. 8 назв.-рус. Деп. в ГНТБ Украины 10.01.95, № 95 – Ук 95.
4. Локтионов И.К. Расчет кривой сосуществования классических непрерывных однокомпонентных систем с парными потенциалами. – в сб. науч. трудов: Теория и моделирование электронного строения и свойств тугоплавких соединений сплавов и металлов. – Киев: изд-во ИПМ им. И.Н. Францевича НАНУ, 1997, С. 25-33.

## СОДЕРЖАНИЕ

1. Улитин Г.М. Роль и задачи математики в формировании инженера.....	3
2. Азарова Н.В., Рубцов М.В., Рубцова О.А. Расчет режимов алмазного шлифования, обеспечиваемых требуемую шероховатость обработанной поверхности.....	8
3. Доктионов И.К., Гусар Г.А. Верификация расчетов плотностей фаз модели простой жидкости .....	12
4. Петренко А.Д. О применении интеграла Дюамеля к решению дифференциальных уравнений.....	18
5. Косолапов Ю.Ф., Фролофф Г.Н. Гюгонио и разрывы решений уравнений математической физики.....	20
6. Косолапов Ю.Ф., Фролофф Г.Н. Гюгонио и проблема совместимости.....	27
7. Абдулин Р.Н. О влиянии неголономных связей на свойства регулируемых систем.....	35
8. Лесина М.Е., Гоголева Н.Ф. Условия существования линейного инвариантного соотношения специального вида.....	39
9. Лесина М.Е., Зиновьева Я.В. Безнутационные движения задачи, описываемой уравнениями Кирхгофа .....	51
10. Гоголева Н.Ф., Зиновьева Я.В. Уравнение аксоидов задачи о движении двух гироскопов Лагранжа, соединенных упругим и неголономным шарниром.....	63
11. Лесина М.Е., Зиновьева Я.В. Частное решение уравнения Абеля для случая, когда одно из тел закреплено в центре масс.....	80
12. Мироненко Л.П. Свободная энергия модели Изинга.....	91
13. Гончаров А.Н. О проверке достоверности отчетных данных.....	117
14. Положий П.В., Медовникова А.А. Применение метода Монте-Карло для определения оптимальной длительности выполнения курсового проекта.....	122
15. Беловодский В.Н. Замечания по поводу одного доказательства формулы ейлора.....	127
16. Беловодский В. Н., Варзар Р. Л. О скорости сходимости метода Зейделя в зависимости от начальных условий.....	132
17. Беловодский В.Н., Сухоруков М.Ю. О существовании «сомнительных» решений уравнения Матье-Дуффинга.....	137
18. Малащенко В.В., Малащенко Т.И. Влияние атомов водорода на динамическое поведение дислокаций в металлах при надбарьерном скольжении.....	143
19. Герасимчук В.С., Савенков Н.В. Расчет частоты вращения коленчатого вала двигателя при минимальном расходе топлива.....	150
20. Малащенко В.В., Малащенко Т.И. Движение элемента дислокационной стенки при высокоскоростном деформировании кристалла.....	155
21. Малащенко В.В., Малащенко Т.И. Динамика дислокаций в магнитных кристаллах.....	158