

Міністерство освіти і науки України
Донецький національний технічний університет

Кафедра "Вища математика"

Збірник науково-методичних робіт

Випуск 3

Донецьк -2005

УДК 512.643, 517. 944(09), 517.926, 519.61/.64, 531.38, 535.36, 539.238, 622.831.

Рекомендовано до друку Радою Донецького Національного технічного Університету

Протокол № 4 від 30. 05. 2003 р.

Збірник науково-методичних робіт. - Вип. 3. - Донецьк: ДонНТУ, 2005. - 198 с.

Процеси гуманізації й гуманітаризації освітньої системи в Україні передбачають виконання значної кількості суттєвих вимог щодо організації навчального процесу у вищих навчальних закладах. Відповідно до цього виникає нагальна потреба в особистісній зорієнтованості навчання, а саме - в створенні потенцій кожного студента.

В збірнику представлено результати науково-методичних досліджень, в яких обґрунтовуються нові підходи до певних питань методики викладання вищої математики, досліджено окремі історичні аспекти розвитку математики, розглянуто низку цікавих задач застосування математики в різних галузях науки і техніки.

Редакційна колегія: проф. Улітін Г.М. - редактор, проф. Тю Н.С., проф. Лесина 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.

© Донецький Національний технічний університет, 2005 р.

Исследование изобарной теплоемкости модельной системы*Локтионов И.К., ТюН.С.**Донецкий национальный технический университет*

В работе [1] из «первых принципов» найдено выражение для свободной энергии системы N частиц, взаимодействующих посредством парного центрального потенциала, допускающего разложение в интеграл Фурье

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

где D - размерность пространства, $\beta = 1/k_b T$ - обратная температура, k_b - постоянная Больцмана, $n = N/V$ - плотность, $v(r)$, $\tilde{v}(k)$ - парный центральный потенциал взаимодействия и его фурье-образ соответственно, $v_0 = v(0)$ - значение потенциала при $r = 0$, $\tilde{v}_0 = \tilde{v}(0)$ - значение фурье-образа потенциала при $k = 0$.

С помощью (1) был получен ряд качественных результатов [2-5], которые не противоречат известным теориям физики простых жидкостей. Однако расчетные значения многих величин не удовлетворительно описывают экспериментальные данные. Причина несоответствия расчетов результатам измерений состоит не в выборе общей формы модельного потенциала и не в способе нахождения его параметров, что может приводить к различным их значениям, а в выражении для свободной энергии.

Поэтому для достижения согласия с результатами измерений в члены (1), связанные с взаимодействием мультипликативно вводятся безразмерные параметры, значения которых подлежат определению. Для удовлетворительного описания эксперимента представляется разумным введение в (1) трех параметров, поскольку наличие одного или двух параметров, калиброванных по одному свойству вещества приводит к тому, что другая характеристика не будет соответствовать эксперименту. Модифицированное выражение для свободной энергии имеет вид

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

где ξ , γ , Δ - подгоночные параметры.

Одним из способов восстановления вводимых параметров состоит в их расчете на основе теплофизических измерений. В качестве экспериментально измеряемой зависимости при определении параметров ξ, γ, Δ можно использовать уравнение состояния

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

Фактически речь идет об экспериментальных наборах P, V, T , по которым рассчитываются ξ, γ, Δ . Для определения ξ, γ, Δ выберем значения P, V, T в критической точке (КТ).

В настоящей работе поставленная задача решается для термодинамической системы с потенциалом взаимодействия вида

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

фурье-образ которого

$$\tilde{v}(k) = \frac{A}{k^2 + a^2} - \frac{B}{(k^2 + a^2)^2} \quad (5)$$

неотрицателен, если выполняется условие $\varepsilon = B/Aa^2 < 1$, ($A > 0, B > 0$). Модельный потенциал (4) обладает характерными чертами «реальных» потенциалов, а его 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 (4) 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 σ, r_m, V_m - нуль и точка минимума и минимум потенциала (6-12) соответственно. Указанная аппроксимация дает следующие выражения параметров потенциала (4)

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

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

Интегрирование (3) с фурье-образом (5) потенциала (4) 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 $w = A/a^2$, $Q = \sqrt{2 + \Delta n \beta w + 2q}$, $q = \sqrt{1 + \Delta n \beta w d}$, $d = 1 - \varepsilon$.

Искомые параметры ξ, γ, Δ являются решениями системы

$$\begin{cases} P_c = P(n_c, T_c) \\ 1 + \gamma \cdot c \cdot d = \xi \frac{a^3 n_c}{12\pi} \frac{\partial^2}{\partial n^2} (Q_c R_c) \\ \gamma \cdot \beta_c \cdot w \cdot d = \xi \frac{a^3}{12\pi} \left(\frac{\partial^2}{\partial n^2} (Q_c R_c) + n_c \frac{\partial^3}{\partial n^3} (Q_c R_c) \right) \end{cases} \quad (7)$$

где $R_c = 2 + \Delta \cdot c - q_c$, $Q_c = \sqrt{2 + \Delta c + 2q_c}$, $q_c = \sqrt{1 + \Delta c d}$. Первое уравнение системы – уравнение (6) в КТ, последние два – уравнения, определяющие критическое состояние, т.е. $(\partial P / \partial n)_T = 0$, $(\partial^2 P / \partial n^2)_T = 0$. Задача решения системы (7) можно упростить путем сведения ее к одному уравнению относительно Δ .

Разделив 2-е уравнение на 3-е, получаем

$$\gamma(\Delta) = - \left(\frac{\partial^2}{\partial n^2} (Q_c R_c) + n_c \frac{\partial^3}{\partial n^3} (Q_c R_c) \right) / n_c c d \frac{\partial^3}{\partial n^3} (Q_c R_c) \quad (8)$$

Из 2-го уравнения находим

$$\xi(\Delta) = (1 + \gamma(\Delta) c d) / \frac{a^3 n_c}{12\pi} \frac{\partial^2}{\partial n^2} (Q_c R_c). \quad (9)$$

Выражение для $\gamma(\Delta)$ подставим теперь в $\xi(\Delta)$, а после этого с их помощью из первого уравнения системы получим уравнение для определения постоянной Δ , которое может быть решено одним из численных методов. Найденное Δ позволяет вычислить $\gamma(\Delta)$ и $\xi(\Delta)$.

Это уравнение в развернутой форме имеет вид

$$F(\Delta) = P_c - \frac{n_c}{\beta_c} - \frac{w d \gamma(\Delta) n_c^2}{2} + \frac{a^3 D(\Delta)}{12\pi \beta_c} \xi(\Delta), \quad (10)$$

где $D(\Delta) = 2 + \left[\frac{c\Delta}{2} - 1 \right] Q(\Delta) - \frac{c\Delta(2+q(\Delta)-d)}{2Q(\Delta)}$, $c = n_c \beta_c w$.

Уравнение имеет единственное решение Δ , которое с точностью до 10^{-6} имеет значение $6,665758567 \cdot 10^{-4}$. Тогда $\gamma = 2,188011 \cdot 10^{-3}$ и $\xi = 0,16343032$.

Расчет изобарной теплоемкости термодинамических систем с потенциалом взаимодействия вида (8) выполняется стандартными методами.

$$C_P = C_V - T \frac{(\partial P / \partial T)_V^2}{(\partial P / \partial V)_T}, \quad (11)$$

$$C_V = C_V^{id} + \xi \frac{k_b V}{2} \int_{\Omega} \frac{d^D k}{(2\pi)^D} \left(\frac{\Delta n \beta v(k)}{1 + \Delta n \beta v(k)} \right)^2, \quad C_V^{id} = \frac{3}{2} k_b N. \quad (12)$$

$$\frac{\partial P}{\partial V} = -\frac{nk_b T}{V} \left\{ 1 + \gamma \beta w d - \xi \Delta \frac{a^3 \beta w}{24\pi} \left[Q + \frac{q+d}{qQ} \left[\frac{\Delta n \beta w}{2} - 1 + \frac{\Delta n \beta w S}{2Q^2} \right] - \frac{1}{Q} \left[S + \frac{\Delta n \beta w d}{2q} \right] \right] \right\}, \quad S = 2 + q - d, \quad (13)$$

$$\frac{\partial P}{\partial T} = k_b \left\{ n - \xi \frac{a^3}{12\pi} \left(P T_1 - \frac{\Delta n \beta w}{2} P T_2 \right) \right\}, \quad (14)$$

где обозначено

$$P T_1 = 2 + \left(\frac{\Delta n \beta w}{2} - 1 \right) Q - \frac{\Delta n \beta w S}{2Q}, \quad (15)$$

$$P T_2 = Q + \frac{q+d}{qQ} \left(\frac{\Delta n \beta w}{2} - 1 + \frac{\Delta n \beta w S}{2Q^2} \right) - \frac{1}{Q} \left(S + \frac{\Delta n \beta w}{2q} \right), \quad (16)$$

$$Q = \sqrt{2 + \Delta n \beta w + 2q}, \quad q = \sqrt{1 + \Delta n \beta w d}.$$

Интеграл, входящий в выражение для изохорной теплоемкости содержит фурье-образ (10) потенциала (8). Поэтому подынтегральная функция представляет собой правильную рациональную дробь, которая разлагается в сумму простейших дробей. Интеграл вычисляется элементарно и изохорная теплоемкость будет иметь вид

$$C_V = C_V^{id} + \xi \frac{\pi k_b V}{2} \left(\frac{\Delta n \beta}{2\pi} \right)^2 \left[\frac{N_1}{2p^3} + \frac{Q_1}{2r^3} + \frac{N_2}{p} + \frac{Q_2}{r} \right], \quad (17)$$

$$\text{где } p^2 = \frac{1}{2} \left(2a^2 + \Delta n \beta A + \sqrt{(\Delta n \beta A)^2 + 4 \Delta n \beta B} \right), \quad (18)$$

$$r^2 = \frac{1}{2} \left(2a^2 + \Delta n \beta A - \sqrt{(\Delta n \beta A)^2 + 4 \Delta n \beta B} \right), \quad (19)$$

$$N_1 = -p^2 \left(\frac{Ap^2 - (Aa^2 - B)}{p^2 - r^2} \right)^2, \quad Q_1 = -r^2 \left(\frac{Ar^2 - (Aa^2 - B)}{p^2 - r^2} \right)^2, \quad (20)$$

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

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

или в компактной форме

$$N_2 = \frac{A^2 p^4 - (Aa^2 d)^2}{(p^2 - r^2)^2} + \frac{2r^2}{p^2 (p^2 - r^2)} N_1, \quad (21)$$

$$Q_2 = \frac{A^2 r^4 - (Aa^2 d)^2}{(p^2 - r^2)^2} - \frac{2p^2}{r^2 (p^2 - r^2)} Q_1. \quad (22)$$

Для вычисления изобарной теплоёмкости требуется знание плотности n вещества при заданном давлении P и температуре T . Значение плотности можно найти, решая уравнение (6). Т.к. значения плотности при различных давлениях и температурах изменяются в пределах от $\propto 10^{24}$ (газовая фаза) до $\propto 10^{27}$ (критические значения), то промежуток, содержащий корень уравнения относительно n довольно широк. Задачу нахождения n можно упростить, т.е. сделать более узким отрезок изоляции корня, разрешая уравнение относительно $q = q(n)$. Для этого выразим

$$\text{сначала } n \text{ из } q = \sqrt{1 + \Delta n \beta w d} : \quad n = \frac{q^2 - 1}{\Delta \beta w d} \quad (23)$$

и подставим (23) в (6), в результате получим уравнение относительно новой неизвестной $q > 0$

$$P = \frac{S(q)}{\beta} + \frac{\gamma w d}{2} S^2(q) - \frac{\xi a^3}{12 \pi \beta} \left[2 + \left(\frac{q^2 - 1}{2d} - 1 \right) Q(q) - \frac{(q^2 - 1)(2 + q - d)}{2d Q(q)} \right],$$

где $S(q) = \frac{q^2 - 1}{\Delta\beta wd}$. Ниже выполнено сравнение расчетных значений C_p с экспериментальными для аргона.

Таблица 1. Значения C_p для аргона при различных температурах и фиксированном давлении $P = 10^5 \text{ Па}$.

Ar $P = 10^5 \text{ Па}$ $T, \text{ К}$	$q = \sqrt{1 + \Delta n \beta w d}$	$n, 10^{25} \text{ м}^{-3}$ $n_{id}, 10^{25} \text{ м}^{-3}$,	Интегральная добавка (12)	C_p удельная эксперимент
150	1,0028398568	4,870293 4,830918	0,289245	538,303544 526
250	1,0010151753	2,899721 2,898551	0,062114	523,511738 521
400	1,0003964557	1,810889 1,811594	0,015162	520,827095 521
600	1,0001762362	1,207357 1,207729	0,004494	520,326688 521
1000	1,0000634587	0,7245291 0,7246377	0,0009709449	520,216123 521
1500	1,0000282065	0,4830554 0,4830918	0,0002877193	520,212951 521

Таблица 2. Значения C_p для аргона при различных давлениях и $T = 150 \text{ К}$.

Ar $T = 150 \text{ К}$ $P, \text{ Па}$	$q = \sqrt{1 + \Delta n \beta w d}$	$n, 10^{25} \text{ м}^{-3}$, $n_{id}, 10^{25} \text{ м}^{-3}$	Интегральная добавка (12)	C_p удельная эксперимент
10^5	1,0028398568	4,870293 4,830918	0,289245	538,303544 526
10^6	1,0303371353	52,74182 48,30918	3,045951	735,955385 609
10^7	1,7740349573	183,859 483,0918	60,866115	6580,5154 1549
10^8	2,3246138806	3770,882 4830,918	94,924322	4236,169 903

Литература

1. Захаров А.Ю., Локтионов И.К. Классическая статистика однокомпонентных систем с модельными потенциалами // ТМФ, 1999, Т.119, №1, С.167-176.
2. Локтионов И.К. Определение критических параметров классической однокомпонентной системы с модельным потенциалом взаимодействия // ТВТ, 2000, Т.38, №3, С. 512-515.
3. Локтионов И.К. Критические параметры однокомпонентных классических систем с парными потенциалами взаимодействия // ФТВД, 1998, Т.8, №1, С. 70-74.
4. Захаров А.Ю., Локтионов И.К., Грановский Я.И. Теория фазового перехода в однокомпонентных классических системах // ТВТ, 1997, Т.35, №3, С 367-372.
5. 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., Гончаров А.Н. Некоторые вопросы ускорения сходимости в приближенных вычислениях рядов и несобственных интегралов	3
2. Гончаров А.Н. О возникновении хаотического поведения у некоторых дискретных математических моделей	12
3. Беловодский В.Н. К методике построения фундаментальных систем решений линейных дифференциальных уравнений	15
4. Беловодский В.Н., Сухоруков М.Ю. Особенности численных решений обыкновенных дифференциальных уравнений	20
5. Откидач В.В., Джюра С.Г., Чурсинов В.И Риски недооценивания роли математической культуры для развития образовательной системы	26
6. Герасимчук В.С. Фундаментальное образование и современные тенденции	34
7. Откидач В.В., Абдулин Р.Н. Ошибки человека и его надежность	41
8. Малащенко В.В. Влияние центров дилатации на динамику дислокаций в гидростатически сжатом кристалле	47
9. Малащенко В. В. Учет размеров примесных атомов при динамическом взаимодействии с дислокациями в рамках континуальной теории	53

10. М.Е. Лесина, Я.В. Зиновьева Уравнения аксоидов для решения задачи о движении по инерции двух гироскопов Лагранжа, описывающего переходной процесс к асимптотическим равномерным вращениям тел ...	59
11. Петренко А.Д. О математике в системе наук.....	88
12. Локтионов И.К., Тю Н.С. Исследование изобарной теплоемкости модельной системы	95
13. Мироненко Л.П. Магнитная неупорядоченность в сверхрешетке, образуемой комплексами ферромагнитных атомов, внедренных в диэлектрический кристалл	101
14. Мироненко Л. П. Теоретико-групповой подход анализа плотности состояний в неупорядоченной магнитной системе кубической структуры.....	113
15. Руссиян С.А, Жовтубрух С.А. Моделирование ложного срабатывания аппаратов защиты от токов утечки, при коммутации отщепления сети шахты	120
16. Косолапов Ю.Ф., Мамичева В.Д Характеристическая задача для квазилинейного гиперболического уравнения в работах Пикара	122
17. Косолапов Ю.Ф., Мамичева В.Д. Задача Коши для квазилинейного гиперболического уравнения в работах Пикара	128
18. Косолапов Ю.Ф., Маринова Е.С. О периодизации истории гиперболических уравнений в XVIII – XIX столетиях	134
19. М.Е. Лесина, Я.В. Зиновьева Условие одного существования линейного инвариантного соотношения в задаче о движении по инерции двух гироскопов Лагранжа	140
20. Паниотов Ю.Н., Прокопенко Н.А. Расчет энергии взаимодействия ядра стопорной дислокации со скоплением.....	154
21. Ехилевский С.Г., Фоменко Т.П. Связь предела с бесконечно малой функцией и формула Тейлора	158
22. Евсеева Е. Г. Кредитно-модульная организация учебного процесса.....	163
23. Павлыш В.Н., Добровольский Ю.Н. Численное решение задачи о напорной фильтрации газовой смеси в сплошной среде (на примере пневмообработки угольного пласта)	170
24. Косолапов Ю.Ф., Мамичева В.Д. Пикар и общие вопросы теории гиперболических уравнений	178
24. Косолапов Ю.Ф., Мамичева В.Д. Пикар и метод Римана	183
25. Тю Н.С., Локтионов И.К., Медовникова А.А. О прикладных задачах в курсе высшей математики	190