УДК 532.6 DOI: 10.18287/2541-7525-2018-24-1-42-46

М.О. Мамчуев[1]

УРАВНЕНИЯ СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА С ДРОБНОЙ ПРОИЗВОДНОЙ РИМАНА — ЛИУВИЛЛЯ

В работе получено два уравнения состояния вещества с использованием дробной производной Римана — Лиувилля. Оба уравнения являются малопараметическими (без привлечения большого количества подгоночных параметров). В предложенном подходе основной задачей является определение параметров уравнении из экспериментальных данных фазовых диаграмм исследуемых веществ.

Ключевые слова: уравнения состояния вещества, дробная производная Римана — Лиувилля, фрактальная структура вещества.

Фрактальной структурой обладают многие твердые материалы. К ним относятся: полимеры, углеродные наноматериалы и нанокомпозиты, пористые вещества (кремний, металлы, горные породы и др). В настоящее время предложено значительное число классических и кванто-механических способов получения уравнений состояния сплошных сред (см. работы [1–4] и ссылки в них). Но для вывода уравнений состояния веществ, интерпретируемых как системы с фрактальной геометрией, требуется привлечение, наряду с методами статистической физики, новых математических методов и, в первую очередь, аппарата дробного исчисления [5–9].Следует отметить, что для твердых тел с фрактальной структурой попытки установить уравнение состояния весьма немногочисленны [4–9]. Современные широкодиапазонные уравнения состояния могут содержать десятки свободных параметров и экспериментально найденных констант. В связи с этим, актуальной остается задача получения уравнения состояния вещества с малым числом параметров.

В работе [6, с. 229] с использованием дробного интегродифференцирования получено уравнение состояния хладона R134, содержащее всего лишь четыре параметра. В работе [7] предложен принципиально новый класс уравнений состояния вещества для тел, интерпретируемых как физические системы с фрактальной структурой (на примере хладона R134). В работе [8] математический аппарат дробного интегродифферНцирования применен в термодинамике для расчета поверхностной энергии и адсорбции Гиббса. Уравнение состояния твердых тел, содержащее в явном виде фрактальную размерность,получено в работе [8] с применением теории Дебая. В работе [9] исследовано уравнение состояния для систем, обладающих дробно-степенным спектром. Получено соотношение между энергией, давлением и объемом для систем, обладающих дробно- степенным спектром. Рассмотрена дробно-дифференциальная модель электрон-фононного взаимодействия. В настоящей работе оператор дробного интегродифференцирования в смысле Римана — Лиувилля применяется для построения уравнения состояния твердого тела с фрактальной структурой (массовый фрактал).

Согласно определению, давление через свободную энергию можно выразить следующей формулой

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = -\frac{1}{V_0}\left(\frac{\partial F}{\partial x}\right)_T, \tag{1}$$

где F — свободная энергия, V_0 - объем, занимаемый одной частицей, $x = V/V_0$ безразмерный объем. В работе [8] было предложено использовать закон композиции дробных производных [4] для введения термодинамической функции – поверхностной энергии. Используя аналогичный прием, для свободной энергии запишем F

$$\frac{dF(x)}{dx} = D^{\alpha}_{1x} D^{1-\alpha}_{1x} F(x),\ 0 < \alpha\ < 1. \tag{2}$$

Здесь D^{α}_{1x} — оператор дробного дифференцирования в смысле Римана — Лиувилля порядка α [5, с. 28]. В работе [8] аналогичный прием применяется для удельной поверхностной энергии. Из (1) и (2) получим

Мамчуев Мухтар Османович (mamchuevmo@yandex.ru), отдел теоретической и математической физики, Институт прикладной математики и автоматизации, 360000, Российская Федерация, г. Нальчик, ул. Шортанова, 89 А.

$$p = \frac{1}{V_0} D^{\alpha}_{1x} f(x), f(x) = D^{1-\alpha}_{1x} F(x). \tag{3}$$

Далее предположим, что функция $f(x)$, имеет следующий вид:

$$f(x) = c\frac{(1-x)^{\alpha}}{\Gamma(\alpha+1)} F(\alpha, 1, \alpha+1, 1-x), \tag{4}$$

где $F(\alpha, \beta, \gamma, z)$ — гипергеометрическая функция Гауса [5, с. 26],c – отличный от нуля параметр.

Учитывая, что $f(1) = 0$, в силу равенств

$$D^{\alpha}_{1x} f(x) = \partial^{\alpha}_{1x} f(x) + \frac{f(1)}{\Gamma(1-\alpha)} (1-x)^{-\alpha},$$

$$D^{\alpha}_{1x} f(x) = \partial^{\alpha}_{1x} f(x) = D^{\alpha-1}_{1x} f'(x),$$

где ∂^{α}_{1x} — производная Капуто [5, с. 11], получим

$$p = -\frac{1}{V_0} D^{\alpha-1}_{1x} f'(x). \tag{5}$$

В силу равенства [5, с. 17]

$$\frac{d}{dz}\left[z^{\gamma-1} F(\alpha, \beta, \gamma, z)\right] = (\gamma-1) z^{\gamma-2} F(\alpha, \beta, \gamma-1, z), \tag{6}$$

$$F(\alpha, \beta, \gamma, z) = (1-z)^{-\beta} \tag{7}$$

получим

$$f'(x) = -\frac{c}{\Gamma(\alpha+1)} \alpha (1-x)^{\alpha-1} F(\alpha, 1, \alpha, 1-x) = -\frac{c}{\Gamma(\alpha)} (1-x)^{\alpha-1} x^{-1}.$$

Из (6) и (8) имеем

$$p = \frac{1}{V_0} \frac{c}{\Gamma(\alpha)} D^{\alpha-1}_{1x} (1-x)^{\alpha-1} x^{-1}. \tag{8}$$

Используя замену $t = 1 - (1-x)\xi$ вычислим интеграл

$$D^{\alpha-1}_{1x} (1-x)^{\alpha-1} x^{-1} = \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_x^1 (1-t)^{\alpha-1} (t-x)^{-\alpha} t^{-1} dt =$$

$$= \frac{1}{\Gamma(1-\alpha)} \int_0^1 \xi^{\alpha-1} (1-\xi)^{-\alpha} (1-(1-x)\xi)^{-1} d\xi =$$

$$= \frac{B(\alpha, 1-\alpha)}{\Gamma(1-\alpha)} F(1, \alpha, 1,\ 1-x) = \Gamma(\alpha) x^{-\alpha}, \tag{9}$$

Подставляя (8) в (9) получим уравнение

$$p = \frac{c}{V_0} x^{-\alpha}. \tag{10}$$

При $\alpha = 1$ дробная производная переходит в обычную производную первого порядка, а уравнение состояния (9) переходит в уравнение состояния идельного газа $pV = c$,где $c = RT$– константа, которая характеризует тепловую энергию частиц. Таким образом, в настоящей работе получено уравнение состояния вещества с использованием дробной производной Римана — Лиувилля. Уравнение состояния является малопараметрическим, в него входит два параметра α и c,которые характеризуют соответственно фрактальную размерность объекта и тепловую энергию частиц (без привлечения большого количества подгоночных параметров). Уравнение предполагается использовать для прогнозирования термодинамических свойств веществ с фрактальной структурой.

Применяя подход описанный выше формулы (1)-(4) предположим, что функция $f(x)$ представима в виде ряда (разложение типа вириального):

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^n, \tag{11}$$

где a_n – коэффициенты, значения которых получаются при обработке экспериментальных значений фазовых диаграмм методом наименьших квадратов.

Описание ударноволнового эксперимента и получение уравнения состояния вещества заключаются в задании "холодной кривой" аналитически с несколькими подгоночными параметрами. Для нахождения соответствующих коэффициентов привлекаются экспериментальные данные сжимаемости и ряд других подгоночных параметров. В интерполяционных уравнениях состояния вещества верхний предел суммирования ∞ заменяется на натуральное число N (в работе [3, с. 40] $N = 7$). Поступая аналогично, и подставляя $f(x) = \sum\limits_{n=0}^{N} a_n x^n$ в (3), получаем уравнение состояния вещества

$$p = \frac{1}{V_0} \sum_{n=0}^{N} a_n \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n-\alpha+1)} x^{n-\alpha} \tag{12}$$

и выражение для свободной энергии

$$F = \sum_{n=0}^{N} a_n \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n-\alpha+2)} x^{n-\alpha+1}. \tag{13}$$

При $N = 1$ функция $f(x)$ линейно зависит от x, и формулы (12) и (13) примут следующий вид:

$$p = \frac{1}{V_0} \left[\frac{a_0}{\Gamma(1-\alpha)} x^{-\alpha} + \frac{a_1}{\Gamma(2-\alpha)} x^{1-\alpha} \right], \tag{14}$$

$$F = \frac{a_0}{\Gamma(2-\alpha)} x^{1-\alpha} + \frac{a_1}{\Gamma(3-\alpha)} x^{2-\alpha}.$$

При $\alpha = 1$ дробная производная переходит в обычную производную первого порядка, а уравнение состояния (12) переходит в уравнение состояния идеального газа $p = \frac{1}{V_0} a_1$.

Если под x понимать безразмерную плотность, т.е. $x = \frac{\rho}{\rho_0}$, то уравнение (12) запишется в следующем виде:

$$p = \frac{x^2 \rho_0}{M_A} \left[\frac{a_0}{\Gamma(1-\alpha)} x^{-\alpha} + \frac{a_1}{\Gamma(2-\alpha)} x^{1-\alpha} \right], \tag{15}$$

где M_A – объем одного моля вещества, ρ_0 – начальная плотность.

Аналогичным способом можно получить формулу для изотермического модуля объемного сжатия:

$$K = \frac{x}{V_0} \sum_{n=0}^{N} a_n \frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n-\alpha+1)} x^{n-\alpha}.$$

При $N = 1$ получим

$$K = \frac{x}{V_0} \left[\frac{a_0}{\Gamma(1-\alpha)} x^{-\alpha} + \frac{a_1}{\Gamma(2-\alpha)} x^{1-\alpha} \right]. \tag{16}$$

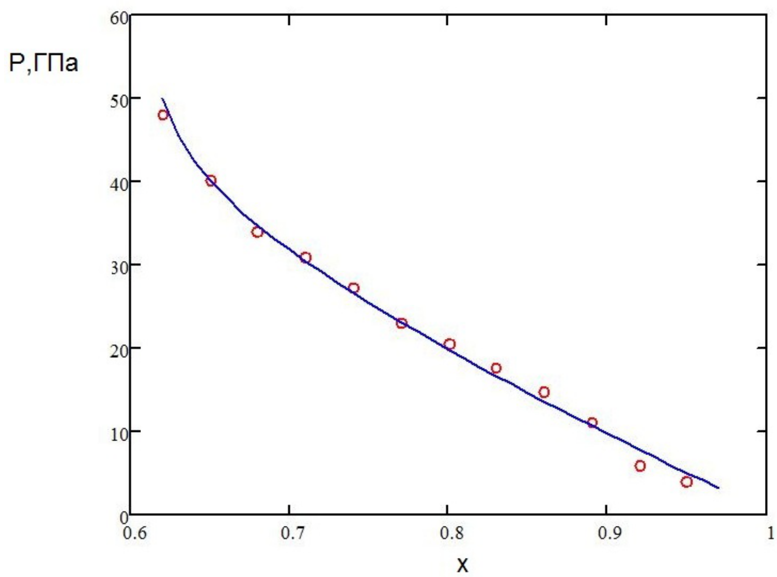

Рис. 1. Результаты расчета фазовой диаграммы железа (экспериментальные данные [2]). Кривая рассчитана по формуле (8), где x – безразмерный объем вещества

Таким образом, в настоящей работе получено два уравнения состояния вещества с использованием дробной производной Римана — Лиувилля. Оба уравнения являются малопараметическими (без привлечения большого количества подгоночных параметров). В предложенном подходе основной задачей является определение параметров уравнении из экспериментальных данных фазовых диаграмм исследуемых веществ. Первое уравнение зависит от двух параметров α и c, которые характеризуют соответственно фрактальную размерность объекта и тепловую энергию частиц. Во второе уравнение состояния входят три параметра: α, a_0, и a_1. Для второго уравнения получено также выражение для свободной энергии и модуля всестороннего сжатия. Уравнение предполагается использовать для прогнозирования термодинамических свойств веществ с фрактальной структурой.

Литература

[1] Фортов В.Е. Уравнения состояния вещества от идеального газа до кварк-глюонной плазмы. М.: Физматлит, 2013. 493 с.

[2] Жарков В.Н., Калинин В.А. Уравнения состояния твердых тел при высоких давлениях и температурах. М.: Наука, 1968. 311 с.

[3] Бушман А.В., Фортов В.Е. Модели уравнения состояния вещества // УФН. 1983. Т.140. № 2 С. 177–232. DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0140.198306a.0177.

[4] Нахушев А.М. Дробное исчисление и его применение. М.: Физматлит. 2003. 272 с.

[5] Нахушева В.А. Об одном классе уравнений состояния вещества // Докл. АМАН. 2005. Т. 7. № 2. С. 101–107.

[6] Нахушев А.М. Об уравнениях состояниях непрерывных одномерных систем и их приложениях. Нальчик: Логос, 1995. 50 с.

[7] Рехвиашвили С.Ш. Применение дробного интегродифференцирования для расчета термодинамических свойств поверхностей // ФТТ. 2007. № 4. С. 756–759.

[8] Рехвиашвили С.Ш. Уравнения состояния твердого тела с фрактальной структурой // Письма в ЖТФ. 2010. № 17. С 42–47.

[9] Алисултанов З.З., Мейланов Р.П. Теплофизические свойства квантово-статистических систем с дробно-степенным спектром // Journal of Siberian Federal University. Mathematics and Physics, 2012, Т. 5. № 3(3), С 349–358.

References

[1] Fortov V.E. *Uravneniia sostoianiia veshchestva ot ideal'nogo gaza do kvark-gliuonnoi plazmy* [Equations of state of matter from an ideal gas to a quark-gluon plasma]. M.: Fizmatlit, 2013, 493 p. [in Russian].

[2] Zharkov V.N., Kalinin V.A. *Uravneniia sostoianiia tverdykh tel pri vysokikh davleniiakh i temperaturakh* [Equations of state of solids at high pressures and temperatures]. M.: Nauka, 1968, 311 p. [in Russian].

[3] Bushman A.V., Fortov V.E. *Modeli uravneniia sostoianiia veshchestva* [Models of the equation of state of matter]. *UFN* [Uspekhi Fizicheskikh Nauk (Advances in Physical Sciences)], 1983, Vol140, no. 2, pp. 177–232 [in Russian]. DOI: https://doi.org/10.3367/UFNr.0140.198306a.0177.

[4] Nakhushev A.M. *Drobnoe ischislenie i ego primenenie* [Fractional Calculus and Its Application]. M.: Fizmatlit, 2003, 272 p. [in Russian].

[5] Nakhusheva V.A. *Ob odnom klasse uravnenii sostoianiia veshchestva* [On a class of equations of state of matter]. *Dokl. AMAN* [Reports of the Adyghe (Circassian) International Academy of Sciences]), 2005, Vol. 7, no. 2, pp. 101–107 [in Russian].

[6] Nakhushev A.M. *Ob uravneniiakh sostoianiiakh nepreryvnykh odnomernykh sistem i ikh prilozheniiakh* [On equations of states of continuous one-dimensional systems and their applications]. Nalchik: Logos, 1995, 50 p. [in Russian].

[7] Rekhviashvili S.Sh. *Primenenie drobnogo integrodifferentsirovaniia dlia rascheta termodinamicheskikh svoistv poverkhnostei* [Application of fractional integro-differentiation for calculation of thermodynamic properties of surfaces]. *FTT* [Solid-State Physics], 2007, no. 4, pp. 756–759 [in Russian].

[8] Rekhviashvili S.Sh. *Uravneniia sostoianiia tverdogo tela s fraktal'noi strukturoi* [Equations of state of a solid with a fractal structure]. *Pis'ma v ZhTF* [Technical Physical Letters], 2010, no. 17, pp. 42–47 [in Russian].

[9] Alisultanov Z.Z, Meilanov R.P. *Teplofizicheskie svoistva kvantovo-statisticheskikh sistem s drobno-stepennym spektrom* [Thermophysical properties of quantum-statistical systems with fractional-power spectrum]. *Journal of Siberian Federal University. Mathematics and Physics*, 2012, Vol. 5, no. 3, pp. 349–358 [in Russian].

M.O. Mamchuev[2]

EQUATIONS OF STATE OF A SOLID BODY WITH A REDUCED DERIVATIVE RIEMANN — LIOUVILLE

Two equations of state of a solid with the use of the fractional Riemann — Liouville derivative are obtained. Both equations are low-parametric (without involving a large number of adjustable parameters). In the proposed approach, the main task is to determine the parameters of the equation from the experimental data of the phase diagrams of the investigated substances.

Key words: equation of state of matter, fractional derivative of Riemann — Liouville, fractal structure of matter.

Статья поступила в редакцию 18/*II*/2018.
The article received 18/*II*/2018.

[2] *Mamchuev Mukhtar Osmanovich* (mamchuevmo@yadex.ru), Department of Theoretical and Mathematical Physics, Institute of Applied Mathematics and Automation, 89 A, Shortanova Street, Nalchik, 360000, Russian Federation.