

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ АВТОНОМНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
**«БЕЛГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ
ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**
(Н И У « Б е л Г У »)

ИНСТИТУТ ИНЖЕНЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ И ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

КАФЕДРА ОБЩЕЙ МАТЕМАТИКИ

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МЕТОДЫ В ТЕРМОДИНАМИКЕ

Выпускная квалификационная работа
обучающегося по направлению подготовки 01.04.01 Математика
очной формы обучения, группы 07001632
Межакова Александра Викторовича

Научный руководитель
доктор технических наук, профессор
Аверин Г.В.

Рецензент
к.ф.-м.н.
Полунин В.А.

БЕЛГОРОД 2018

ОГЛАВЛЕНИЕ

ВВЕДЕНИЕ.....	4
1 СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА И ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЙ.....	8
1.1 Математические методы в термодинамике.....	8
1.2 Численные методы и используемые программные продукты для вычислений термодинамических величин.....	14
1.3 Выводы и задачи исследования.....	27
2 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИИ В ТЕРМОДИНАМИКЕ.....	29
2.1 Аксиоматические методы в термодинамике.....	29
2.2 Принятые гипотезы, геометрические аксиомы и положения термодинамики.....	39
2.3 Вычислительные задачи термодинамики.....	42
2.4 Выводы.....	46
3 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММЫ MATLAB ДЛЯ РЕШЕНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ОПИСАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ.....	47
3.1 Продукт MATLAB для решения геометрических задач описания термодинамических процессов.....	47
3.2 Подпрограммы, описание функций	52
3.3 Реализация вычислительных экспериментов	55
3.4 Выводы.....	56
4 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ....	57
ЗАКЛЮЧЕНИЕ.....	61
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	63
Приложение А. Построение характеристической поверхности состояний азота.....	66
Приложение Б. Построение характеристической поверхности состояний водорода	67

Приложение В. Построение характеристической поверхности состояний воздуха.....	68
--	----

ВВЕДЕНИЕ

Математический аппарат в термодинамике использует эмпирические соотношения и дифференциальные уравнения для функций нескольких переменных. Термодинамические соотношения и закономерности, выраженные в математическом виде, достаточно сложны. Исходя из этого, применение аппарата дифференциальной геометрии позволяет внести ясность и наглядность в решение термодинамических задач, так как те же положения термодинамики имеют геометрическое представление.

В основу теории термодинамики положен феноменологический метод. Задачей этого метода является установление связей между непосредственно наблюдаемыми (измеряемыми в макроскопических опытах) величинами, такими как давление, объем, температура, напряженность электрического или магнитного поля и др.

Математический аппарат термодинамики строится на фундаментальных законах, которые называют также началами или постулатами. Они рассматриваются как результат обобщения многочисленных явлений, наблюдаемых в макроскопическом мире. Начала термодинамики разделяют физически реализуемые способы изменения состояния равновесной системы.

Уравнения состояния обобщают опытные данные и являются в термодинамике связующим звеном между теорией и экспериментом.

Суть построения уравнений для некоторого класса термодинамических систем заключается в приближении одной зависимостью всей поверхности состояний термодинамической системы (или ее областей), которая может представлять сложный вид и для каждого вещества иметь свои особенности.

Из теории следует, что для каждой термодинамической системы существует физическая величина – энтропия, значение которой зависит от состояния системы (функция состояния) и изменение которой происходит

только под действием энергии, передаваемой в виде теплоты (тепловая координата) или совершения работы. Если она изменяется, то наблюдается теплообмен между рабочим телом и окружающей средой. Аналитическое выражение принципа существования энтропии: для равновесного процесса изменение энтропии ds и количество передаваемого тепла dq связаны соотношением $ds=dq/T$ (вытекает из второго начала термодинамики).

Актуальность темы выпускной квалификационной работы обусловлена тем, что все предложенные к настоящему времени в литературе геометрические методы в термодинамике слабо изучены, либо являются нестрогими в математических формулировках.

Цель диссертационной работы – применить аппарат дифференциальной геометрии к термодинамике при построении термодинамических уравнений состояний, представляемых в пространстве состояний термодинамической системы в виде многомерных поверхностей.

Для достижения поставленной цели в работе решены следующие задачи:

- изучено применение математических методов в термодинамике, проанализированы численные методы и программные продукты для вычислений термодинамических величин;
- рассмотрены методы дифференциальной геометрии в приложении к термодинамике, геометрические аксиомы, положения и вычислительные задачи термодинамики;
- выбран программный продукт для реализации вычислительных экспериментов, разработан алгоритм на основе средств дифференциальной геометрии и проведены вычислительные эксперименты;
- сформулированы задачи перспективных исследований.

Для решения поставленных задач использовались следующие методы:

- систематизация источников информации по теме исследования;
- метод системного анализа применительно к описанию процессов;

- методы дифференциальной геометрии и функционального анализа, методика решений дифференциальных уравнений;
- математическое моделирование и расчетные компьютерные методы применительно к исследуемым процессам;
- методы обобщения информации и статистической обработки данных;
- апробация полученных результатов.

На защиту выносятся следующие положения:

- отдельные представления термодинамических положений и соотношений методами дифференциальной геометрии;
- алгоритмы решения и представления уравнений состояний средствами дифференциальной геометрии и вычислительной математики;
- результаты вычислительных экспериментов построения термодинамических поверхностей.

Практическая значимость результатов диссертационной работы заключается в приложении методов и средств дифференциальной геометрии и решения геометрических задач при описании термодинамических процессов с использованием математических методов в термодинамике.

Структура и объем работы: выпускная квалификационная работа выполнена на 68 страницах машинописного текста, состоит из введения, четырех глав, заключения и приложения.

В первой главе изучается применение математических методов в термодинамике, анализируются численные методы и программные продукты для вычислений термодинамических величин.

Во второй главе рассматриваются методы дифференциальной геометрии в приложении к термодинамике, геометрические аксиомы, положения и вычислительные задачи термодинамики.

В третьей главе описываются основные функции вычислительной программы, реализуются вычислительные эксперименты.

В четвертой главе формируются задачи перспективных исследований.

В заключении, по итогам проделанной работы, сформулированы выводы.

В приложении представлены реализованные вычислительные эксперименты.

1 СОСТОЯНИЕ ВОПРОСА И ЗАДАЧИ ИССЛЕДОВАНИЯ

1.1 Математические методы в термодинамике

В современной системе наук наблюдается процесс конвергенции между науками. Каждая наука в своем развитии не только углубляет свои знания о природе, но и расширяет границы своих исследований.

Так как термодинамика изучает макроскопические системы – физические тела конечных размеров, состоящие из большого числа частиц, то базовым понятием является определение термодинамической системы. Термодинамическая система – это совокупность макроскопических тел и полей физической природы, которые могут представлять собой целостный объект и обмениваться энергией и веществом, как между собой, так и с внешней средой [16].

Состояния термодинамических систем могут быть равновесными и неравновесными. Если состояние системы не изменяется во времени, то считают, что система находится в равновесном состоянии. Переходы из одного состояния в другое определяют поведение системы и называются процессами.

Параметры, которые описывают систему, находящуюся в состоянии равновесия, называют термодинамическими переменными. Функции термодинамических переменных называют термодинамическими функциями состояния, а уравнения, связывающие такие переменные, – уравнениями состояния. Если изменение термодинамической величины зависит от пути, по которому происходит термодинамический процесс, то величина является функцией процесса (функцией линии) [5].

Существует функция состояния, называемая температурой, которая принимает одно и то же значение для всех частей системы, находящейся в состоянии термодинамического равновесия. В термодинамике такую температуру называют абсолютной и обозначают буквой T .

Первоначально в основу измерения температур были положены два закона – закон Шарля и закон Гей-Люссака, которые представляются в виде:

$$p = p_0(1 + \alpha_v \cdot \theta) | V = \text{const}; \quad (1.1)$$

$$V = V_0(1 + \alpha_p \cdot \theta) | p = \text{const}, \quad (1.2)$$

где V – объем газа при постоянном давлении; p – давление газа при постоянном объеме, α_p – температурный коэффициент объемного расширения; α_v – температурный коэффициент термической упругости [8].

Закон Шарля имеет следующую формулировку: если данная масса газа нагревается или охлаждается в интервале температур (от 0 до $\theta^\circ\text{C}$), причем объем газа остается постоянным, то температурный коэффициент термической упругости не зависит от природы газа.

Также представляется и закон Гей-Люссака: если данная масса газа нагревается или охлаждается в интервале температур (от 0 до $\theta^\circ\text{C}$), причем давление газа остается постоянным, то температурный коэффициент объемного расширения не зависит от природы газа [9].

Математически эти законы выражаются зависимостями (1.1)-(1.2) и рассматриваются как точные по отношению к веществам, находящимся в идеально-газовом состоянии, при условии, что давление газа очень мало ($p \rightarrow 0$). На практике для простых газов давление в одну атмосферу и ниже считается достаточно низким. Экспериментально установлено, что для идеальных газов

$$\alpha = \alpha_v = \alpha_p = \frac{1}{273,15} = 0,003661 \text{ } ^\circ\text{C}.$$

В рамках феноменологической термодинамики все уравнения состояния основаны на эмпирических, то есть наблюдаемых закономерностях. Наиболее подходящим термометрическим веществом

является идеальный газ, который отличается простой физической структурой. Законы Шарля и Гей-Люссака, объединенные с гипотезой Авогадро, дали известный газовый закон, который стал первой важной зависимостью для свойств веществ в термодинамике [2].

Данный закон представляется известным уравнением Клайперона, которое получено опытным путем:

$$p \cdot v = R_i \cdot T, \quad (1.3)$$

где R_i – индивидуальная газовая постоянная. Данную зависимость можно представить также в виде:

$$\frac{T}{T_0} = \frac{p}{p_0} \cdot \frac{v}{v_0}. \quad (1.4)$$

Здесь v_0 – значение удельного объема газа в опорной точке (точке таяния льда); p_0 – стандартизированное значение давления, равное 10^5 Па; $T_0=273,15$ К; $R_i = \frac{p_0 \cdot v_0}{T_0}$.

Наблюдаемые отклонения состояний реальных газов от закона идеального газа обычно достаточно малы и связаны с природой молекул. Уравнение Ван-дер-Ваальса, вириальное уравнение и другие уравнения состояния, которые количественно выражают эти отклонения, оказали сильное влияние на прогресс в развитии термодинамики и процесс построения шкал температур [3].

Первоначально температурные шкалы устанавливались по различным термометрическим веществам, но потом было определено, что благодаря своим свойствам одним из самых удобных термометрических веществ является идеальный газ. При этом температура может быть определена из соотношения $T = p \cdot v / R_i$.

В термодинамике идеальным газом считается газ, параметры состояния которого строго подчиняются уравнению вида (1.3). В идеальном газе молекулы рассматриваются как материальные точки, силами притяжения и отталкивания между которыми можно пренебречь, а взаимодействие молекул ограничено соударениями. Идеальный газ отличается низкой плотностью вещества, многие простые газы (водород, кислород, азот, гелий, неон и другие) при низких давлениях ведут себя как идеальный газ, т.е. строго подчиняются уравнению (1.3).

Таким образом, идеальный газ и законы идеального газа являются абстрактной моделью в термодинамике, связь которой с реальностью видна в том, что состояния простых реальных газов стремятся к предельному состоянию идеального газа.

Построение шкал температур тесно связано с уравнением состояния идеального газа. Но вопрос установления класса функций, которые позволяют реализовать уравнения состояния термодинамических систем, остается открытым [19].

Факт вида уравнения состояния идеального газа (1.3) основан на эмпирических данных и закономерностях, установленных методами молекулярно-кинетической теории.

При построении уравнений состояний термодинамических систем сначала вводится параметризация – пространство состояний представляется областью числового пространства. Это дает возможность описать каждое состояние набором чисел – параметрами основных свойств термодинамической системы. Далее используется координатный метод, когда параметры задаются в виде независимых координат точек, которые формализуют геометрическое представление каждого состояния системы.

Все три параметра p , v и T выступают в качестве независимых переменных – параметров пространства состояний термодинамических систем и образуют декартовую систему координат. Таким образом, зависимость $T = F(p, v)$ или $F(p, v, T) = 0$ является уравнением поверхности,

построенной относительно взаимно перпендикулярных осей, каждая из которых соответствует характерному параметру p , v и T .

Любое состояние системы, которое определяется совокупностью трех числовых значений параметров, изобразится точкой, лежащей на полученной поверхности. Эту точку называют фигуративной, а поверхность – характеристической. Например, поверхность состояния $T = F(p, v)$ идеального газа имеет вид, показанный на рисунке 1.1.

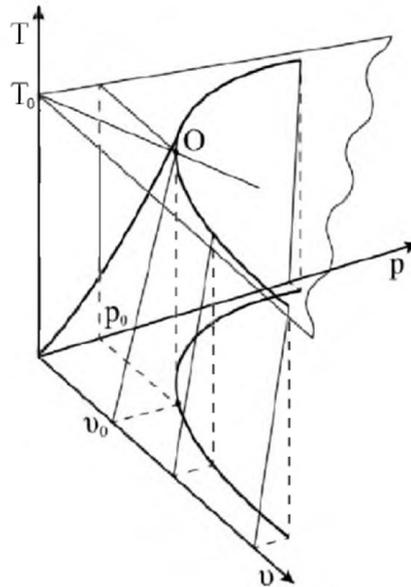


Рисунок 1.1 – Геометрическая поверхность термодинамических состояний идеального газа $T = T(p, v)$

При изменении состояния системы фигуративная точка перемещается по поверхности, описывая кривую протекающего процесса. Характеристическая поверхность, которая называется поверхностью состояний, представляет собой геометрическое место точек, отображающих состояния системы в зависимости от характерных параметров. Такие поверхности обобщают весь имеющийся массив экспериментальных данных по тепловым взаимодействиям.

Форма таких поверхностей зависит от вида газа через коэффициент R_i , причем все поверхности простых реальных газов при низких давлениях

асимптотически выходят на поверхности идеальных газов, которая описывается уравнением (1.4).

Особое место в термодинамике занимает калорическая характеристика – теплоемкость. Для твердых тел и жидкостей теплоемкость определяется в виде

$$c = \frac{dQ}{dT} \quad (1.5)$$

и представляет собой количество теплоты, необходимое для изменения температуры термодинамической системы на один градус Кельвина (1 К) [12].

Для газов уравнение (1.5) обычно представляется в виде

$$c_n = \frac{dQ_n}{dT}, \quad (1.6),$$

показывая при этом зависимость теплоемкости от вида протекающего процесса. В общем случае теплоемкость является функцией процесса и может численно изменяться от $-\infty$ до $+\infty$. Чаще всего применение имеют теплоемкости при постоянных объеме c_v и давлении c_p .

Опытный материал, относящийся к теплоемкостям веществ обширен. Разработано достаточное количество методов определения теплоемкостей для газов, твердых тел и жидкостей [14].

Теплоемкости определяют взаимодействие вещества с окружающей средой в различных термодинамических процессах. Теплоемкость зависит от свойств вещества, состояния системы и характера термодинамического процесса, который совершается системой.

Уравнения состояния термодинамических систем геометрически представляются следующим образом. В трехмерном пространстве независимых переменных v , p и T , образующих систему декартовых координат, размещено множество характеристических поверхностей, которые определяют поверхности состояний различных термодинамических систем. Каждое состояние представляется некоторой точкой $M(v, p, T)$ на определенной характеристической поверхности. Через точку M можно

провести бесконечное количество кривых l , полностью принадлежащих характеристической поверхности и представляющих собой различные термодинамические процессы. В окрестности точки M каждому направлению \vec{n} , которое задается касательной к кривой процесса l в точке M , будет соответствовать определенное значение теплоемкости c_n , которая может быть экспериментально определена в соответствии с уравнением (1.6). В окрестности точки M возможны только процессы, принадлежащие характеристической поверхности [15].

Таким образом, в термодинамическую теорию через уравнения состояния, теплоемкости и другие величины (теплоты испарения, кипения) вводятся эмпирические данные, которые позволяют учесть различные особенности и закономерности, характерные для реальных веществ и термодинамических процессов. При этом состояния, процессы и сами уравнения состояний могут быть представлены средствами дифференциальной геометрии в виде точек, кривых или поверхностей.

1.2 Численные методы и используемые программные продукты для вычислений термодинамических величин

В большинстве случаев на практике получить точное решение возникшей математической задачи не удастся, так как искомое решение не выражается в элементарных функциях. Поэтому, численные методы приобрели большое значение в различных областях науки и техники.

К настоящему времени разработано большое количество численных методов. Одни обладают большей общностью, другие имеют специальное назначение и используются для узкого круга физических задач.

Движение космических объектов, кинетика химических реакций, динамика биологических популяций в природе, модели экономического

развития и т.п., все эти явления исследуются при помощи численных методов.

Рассмотрим уравнение, имеющее большое значение в дифференциальной геометрии [14]

$$ap + bq = c, \quad (p = u_x, q = u_y), \quad (1.7)$$

где a, b, c – заданные функции от x, y, u , которые в рассматриваемой области имеют непрерывные частные производные первого порядка и удовлетворяют условию $a^2 + b^2 \neq 0$.

Решение $u = u(x, y)$ уравнения (1) геометрически представляет собой интегральную поверхность в пространстве (x, y, u) . Эту поверхность будем называть интегральной поверхностью.

Функции $a(x, y, u)$, $b(x, y, u)$ и $c(x, y, u)$ определяют некоторое поле направлений в пространстве (x, y, u) : в каждой фиксированной точке этого пространства имеется направление, направляющие косинусы которого пропорциональны a, b и c . Интегральные кривые, соответствующие этому полю направлений, определяются системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dx}{a(x, y, u)} = \frac{dy}{b(x, y, u)} = \frac{du}{c(x, y, u)} \quad (1.8)$$

и называются характеристическими кривыми или характеристиками уравнения (1.7). Если ввести параметр s , изменяющийся вдоль характеристической кривой, то дифференциальные уравнения (1.8) примут вид

$$\frac{dx}{ds} = a(x, y, u), \quad \frac{dy}{ds} = b(x, y, u), \quad \frac{du}{ds} = c(x, y, u). \quad (1.9)$$

Величины p, q и (-1) пропорциональны направляющим косинусам нормали к интегральной поверхности $u = u(x, y)$ и уравнение (1.7) выражает условие перпендикулярности $ap + bq + c(-1) = 0$ нормали к интегральной поверхности с направлением поля, т. е. уравнение (1.7) сводится к

требованию, чтобы в каждой точке интегральной поверхности $u = u(x, y)$ направление, определяемое указанным выше полем направлений, находилось в касательной плоскости к поверхности [13].

Если некоторая поверхность $u = u(x, y)$ образована характеристиками уравнения (1.7), то в каждой точке этой поверхности касательная к характеристике, проходящей через эту точку, лежит в касательной плоскости к поверхности и, следовательно, эта поверхность является интегральной поверхностью уравнения (1.7). Обратно, если $u = u(x, y)$ есть интегральная поверхность уравнения (1.7), то ее можно покрыть семейством характеристик. Действительно, на любой интегральной поверхности $u = u(x, y)$ уравнения (1.7) можно задать однопараметрическое семейство кривых $x = x(s), y = y(s), u = u(x(s), y(s))$ с помощью дифференциальных уравнений

$$\frac{dx}{ds} = a(x, y, u), \quad \frac{dy}{ds} = b(x, y, u), \quad (1.10)$$

где u заменено его выражением $u = u(x, y)$. Вдоль каждой такой кривой уравнение (1.7) переходит в $\frac{du}{ds} = c$. Таким образом, рассматриваемое семейство удовлетворяет уравнениям (1.9) и, следовательно, состоит из характеристических кривых.

Так как решения системы дифференциальных уравнений (1.9) однозначно определяются начальными значениями x, y, u при $s=0$, получаем, что любая характеристическая кривая, имеющая общую точку с интегральной поверхностью, целиком лежит на этой интегральной поверхности [17].

Задача Коши. Пусть пространственная кривая l задана в параметрической форме $x = x(t), y = y(t), u = u(t)$, причем $x_t^2 + y_t^2 \neq 0$. Обозначим через l_0 проекцию кривой l на плоскость xOy .

Задача Коши для уравнения (1.7) ставится так: в окрестности проекции l_0 найти интегральную поверхность уравнения (1.7), проходящую через заданную кривую l , т. е. найти такое решение уравнения (1.7), которое принимает заданные значения в точках кривой l_0 . Будем предполагать, что

начальные функции $x(t)$, $y(t)$, $u(t)$ непрерывно дифференцируемы в рассматриваемой области [7].

Для решения задачи Коши проведем через каждую точку кривой l характеристику, т. е. интегральную кривую системы (1.9); это можно сделать, причем единственным образом, в некоторой окрестности кривой l . Получаем семейство характеристических кривых, зависящих еще от параметра t .

$$x = x(s, t), y = y(s, t), u = u(s, t). \quad (1.11)$$

В силу наших предположений функции (1.11) имеют непрерывные производные первого порядка по s и t . Кривые (1.11) образуют поверхность $u = u(x, y)$, если из первых двух уравнений (1.11) можно выразить s и t через x и y . Для этого достаточно, чтобы на кривой l не обращался в нуль якобиан

$$\Delta = x_s y_t - x_t y_s = a y_t - b x_t. \quad (1.12)$$

Если на l выполняется условие $\Delta \neq 0$, то u является функцией x и y . Эта функция и есть решение уравнения (1.7). Воспользовавшись правилом дифференцирования сложной функции и уравнениями (1.9), получим

$$\frac{du}{ds} = u_x a + u_y b. \quad (1.13)$$

Однако $\frac{du}{ds} = c$ и, следовательно, $u(x, y)$ удовлетворяет уравнению (1.7). Единственность решения задачи Коши следует из того, что характеристическая кривая, имеющая одну общую точку с интегральной поверхностью, полностью лежит на этой поверхности. Это значит, что любая интегральная поверхность, проходящая через кривую l , целиком содержит семейство характеристик, проходящих через l , и совпадает с $u = u(x, y)$.

Если $\Delta = 0$ всюду на кривой l и если существует интегральная поверхность $u = u(x, y)$ с непрерывными производными первого порядка, проходящая через l , то эта кривая должна быть характеристикой. Действительно, в этом случае параметр t на кривой l можно выбрать так, что вдоль этой кривой $a = \frac{dx}{dt}$, $b = \frac{dy}{dt}$. Далее, подставляя в $u(x, y)$ выражения

$x = x(t)$, $y = y(t)$ и дифференцируя по t , будем иметь $\frac{du}{dt} = u_x a + b u_y$. Отсюда, учитывая, что $u(x, y)$ есть решение уравнения (1.7), получим $\frac{du}{dt} = c$; следовательно, l является характеристикой. Но, если l – характеристика, то через нее проходит не только одна, а бесконечно много интегральных поверхностей.

В самом деле, проведем через любую точку кривой l кривую l' , которая уже не является характеристикой. Интегральная поверхность, проходящая через l' , обязательно содержит характеристику l . Таким образом, множество решений задачи Коши для характеристики l определяется множеством кривых l' . Все интегральные поверхности, проходящие через кривые этого множества, содержат характеристику l . Следовательно, характеристики являются линиями пересечения интегральных поверхностей линиями ветвления, тогда как через нехарактеристическую кривую не может проходить более одной интегральной поверхности [22].

Свойство 1. Если $\Delta \neq 0$ всюду на начальной кривой l , то задача Коши для уравнения (1.7) имеет одно и только одно решение. Если же $\Delta = 0$ всюду на l , то для того чтобы задача Коши имела решение, кривая l должна быть характеристикой. В этом случае задача Коши имеет бесконечно много решений.

Заметим, что без предположения о непрерывной дифференцируемости решения $u(x, y)$ на кривой l не можем из равенства $\Delta = 0$ на l сделать вывод, что l – характеристика. В самом деле, может случиться, что l – не характеристика, вдоль нее $\Delta = 0$, и через l проходит интегральная поверхность, но такая, что частные производные от $u(x, y)$ перестают быть непрерывными в точках l , так как кривая l является особой линией интегральной поверхности.

Рассмотрим уравнение

$$(y^2 - u) \cdot p + u \cdot q = u. \quad (1.14)$$

Система (1.9) имеет вид

$$\frac{dx}{ds} = y^2 - u, \frac{dy}{ds} = y, \frac{du}{ds} = u \quad (1.15)$$

и ее решение, выраженное через начальные значения переменных (x, y, u) , будет

$$x = \left(\frac{1}{2}y_0^2 e^s - u_0\right) e^s + x_0 + \left(u_0 - \frac{1}{2}y_0^2\right), y = y_0 e^s, u = u_0 e^s. \quad (1.16)$$

Положим, что кривая l , через которую должна проходить интегральная поверхность, задана уравнениями

$$x_0 = 1, y_0 = t, u_0 = \frac{1}{2}t^2. \quad (1.17)$$

Подставив (1.17) в (1.16), получим

$$x = \frac{t^2}{2}(e^s - 1)e^s + 1, y = te^s, u = \frac{t^2}{2}e^s. \quad (1.18)$$

Определитель

$$\Delta = x_s y_t - x_t y_s = \frac{t^2}{2} e^{2s} \quad (1.19)$$

не обращается в нуль при $s = 0$ и $t \neq 0$. Исключая s и t , получим уравнение интегральной поверхности

$$u = 1 - x + \frac{y^2}{2}. \quad (1.20)$$

Пусть теперь кривая l задана уравнениями:

$$x_0 = 0, y_0 = t, u_0 = t^2. \quad (1.21)$$

Подставив (15) в (10), найдем, что

$$x = t^2 e^s (\operatorname{ch} s - 1), y = te^s, u = t^2 e^s. \quad (1.22)$$

Определитель $\Delta = te^s(e^s - 1)$ обращается в нуль при $s = 0$, т. е. вдоль l , хотя l не характеристика. Исключая s и t , получим

$$u(x, y) = y(y \pm \sqrt{2x}), \quad (1.23)$$

т. е. две интегральные поверхности уравнения (1.14), проходящие через кривую (1.21). В данном случае $p = \text{const}$ и эта частная производная обращается в бесконечность вдоль линии (1.21).

Для расчета термодинамических величин имеется ряд программ, при помощи которых можно вычислить необходимые нам показатели системы. К ним относятся:

1. VXGP – пакет программ для вычисления свойств газов. Окно программы представлено в соответствии с рисунком 1.2.

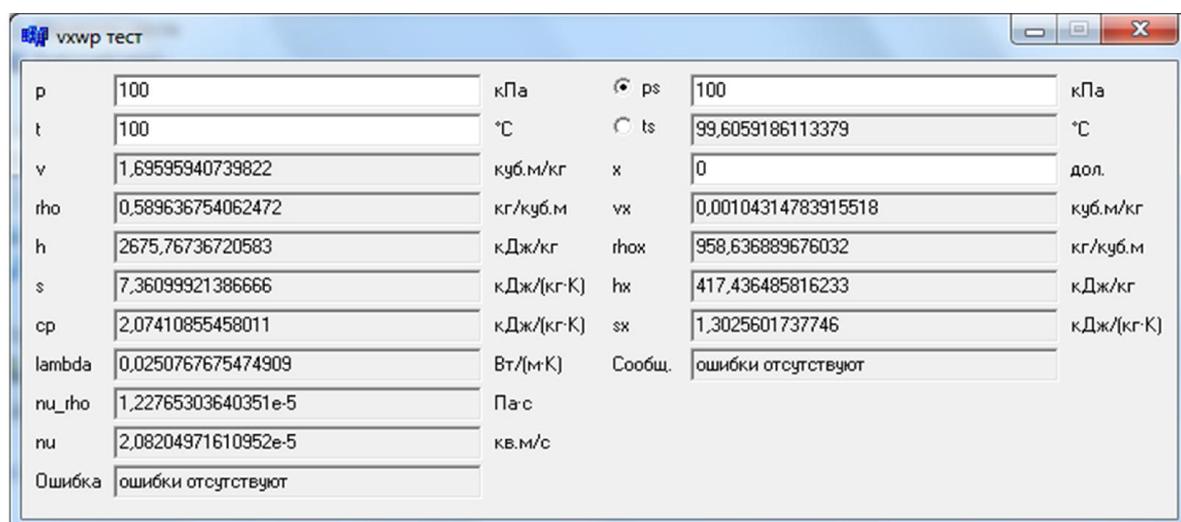


Рисунок 1.2 – Рабочее окно программы VXGP

Газы считаются идеальными, свойства зависят только от температуры. Функции vxgp могут использоваться в документах MathCAD, Excel и прикладных программах. Вычисления проводятся по следующим уравнениям:

- Термодинамические свойства: IAPWS-IF97.
- Коэффициенты переноса: IAPWS-IF77 (теплопроводность) и IAPWS-IF75 (вязкость).

Свойства:

- Давление на линии насыщения [Па] в зависимости от температуры [K].
- Температура на линии насыщения [K] в зависимости от давления [Па].

- Удельный объем [куб.м/кг] в зависимости от температуры [К] и степени сухости [дол.].
- Энтальпия [Дж/кг] в зависимости от температуры [К] и степени сухости [дол.].
- Энтропия [Дж/(кг·К)] в зависимости от температуры [К] и степени сухости [дол.].
- Удельная теплота парообразования [Дж/кг] в зависимости от температуры [К].
- Степень сухости [дол.] в зависимости от температуры [К] и удельного объема [куб.м/кг].
- Степень сухости [дол.] в зависимости от температуры [К] и энтальпии [Дж/кг].
- Степень сухости [дол.] в зависимости от температуры [К] и энтропии [Дж/(кг·К)].
- Удельный объем [куб.м/кг] в зависимости от давления [Па] и температуры [К].
- Энтальпия [Дж/кг] в зависимости от давления [Па] и температуры [К].
- Энтропия [Дж/(кг·К)] в зависимости от давления [Па] и температуры [К].
- Изобарная теплоёмкость [Дж/(кг·К)] в зависимости от давления [Па] и температуры [К].
- Теплопроводность [Вт/(м·К)] в зависимости от давления [Па] и температуры [К].
- Динамическая вязкость [Па·с] в зависимости от давления [Па] и температуры [К].
- Кинематическая вязкость [кв.м/с] в зависимости от давления [Па] и температуры [К].

Область определения функций: давление – от 611.657 до 100×10^6 Па, температура – от 273.16 до 1073.15 К.

Коэффициенты переноса: обобщение данных из разных источников. Газы: H_2O , CO_2 , N_2 , O_2 , CO , H_2 , сухой воздух, влажный воздух (задается содержание воды (кг/кг)), продукты полного сгорания (задается содержание воды (дол.об.н.у.)), произвольная смесь газов (задается содержание газов (кг) или (куб.м н.у.)). Область определения функций:

- При вычислении теплофизических свойств – от -50 до $1500^\circ C$.
- При вычислении коэффициентов переноса – от -50 до $1000^\circ C$.
- Содержание воды в продуктах полного сгорания – от 0 до 0.25 дол.об.н.у. [24].

2. Программа СТАРС – проверенная программа для расчета теплофизических свойств и фазового состояния индивидуальных веществ, нефтяных фракций, смесей, в том числе смесей углеводородов с нефтяными фракциями, как в отдельной точке, так и в заданном диапазоне температур и давлений. Окно программы представлено в соответствии с рисунком 1.3.

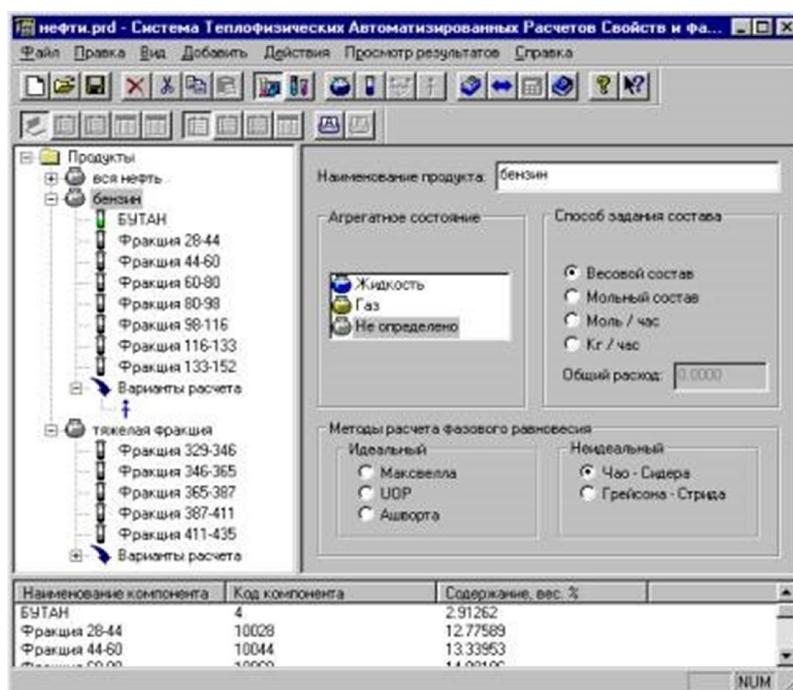


Рисунок 1.3 – Рабочее окно программы СТАРС

Благодаря продуманной организации диалогового ввода и доступной в любой момент контекстной подсказке освоение программы СТАРС не

требует специального обучения и не занимает много времени. Информационный фонд пакета содержит опорные константы для 1597 индивидуальных веществ, необходимых для расчета их теплофизических свойств.

Программа СТАРС работает на Intel-совместимых ПЭВМ в среде Windows XP/Vista/7/8. Номенклатура рассчитываемых свойств жидкой и газообразной фаз включает:

- плотность;
- коэффициент сжимаемости;
- кинематическая вязкость;
- динамическая вязкость;
- энтропия;
- давление насыщенных паров;
- теплопроводность;
- поверхностное натяжение;
- энтальпия;
- изобарная теплоемкость;
- изохорная теплоемкость газов;
- скорость звука для газов;
- показатель адиабаты для газов;

Выполняется пересчет разгонки по Энглеру в разгонку по ИТК. Для мазутов (жидкости) по ГОСТ 10585 при давлении 1 ата определяются:

- плотность;
- изобарная теплоемкость;
- кинематическая вязкость;
- теплопроводность.

На линии насыщения рассчитываются следующие свойства:

- давление насыщенных паров;
- температура насыщенных паров;

- энтальпия;
- энтропия;
- изобарная теплоемкость;
- изохорная теплоемкость для газов;
- динамическая вязкость;
- плотность;
- теплота парообразования;
- кинематическая вязкость;
- показатель адиабаты для газов;
- скорость звука для газов;
- поверхностное натяжение;
- коэффициент сжимаемости.

Программа СТАРС позволяет находить следующие величины, относящиеся к задачам фазового равновесия:

- 1) однократное испарение;
- 2) давление точки кипения;
- 3) давление точки росы;
- 4) температура после дросселирования (IT-диаграмма);
- 5) изоэнтропное расширение (TS-диаграмма);
- 6) температуру точки кипения;
- 7) температуру точки росы;
- 8) расход при изоэнтропном расширении с учетом критического истечения.

Эти задачи решаются:

- для неидеальных смесей на основе методик Чао-Сидера и Грейсона-Стрида;
- для идеальных смесей на основе методик Максвелла, Ашворта и Максвелла-Бонелла.

Дополнительно к расчету теплофизических свойств и фазовых равновесий программа имеет следующие сервисные функции:

- пересчитываются физические величины и единицы состава
- выдается справка по опорным константам индивидуальных веществ из информационной базы (молекулярному весу, критическим температуре и давлению и др.) [25].

3. Программа для расчета свойств воды, водяного пара, газов и смесей газов WaterSteamPro. Окно программы представлено в соответствии с рисунком 1.4.

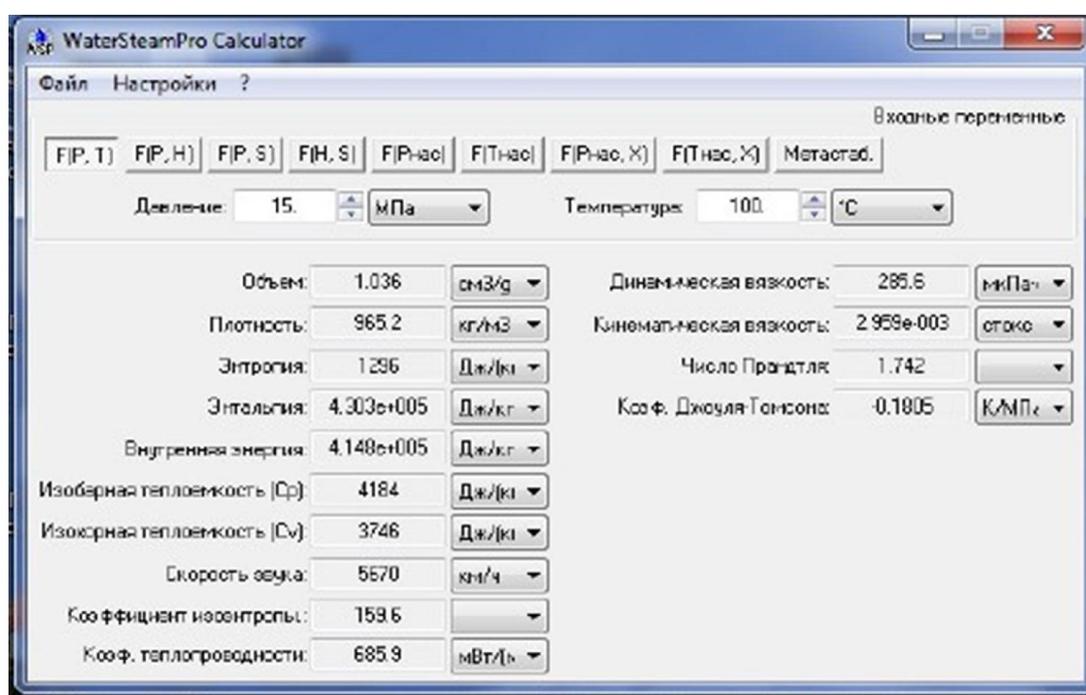


Рисунок 1.4 – Рабочее окно программы WaterSteamPro

В пакете WaterSteamPro определено более 300 функций для вычислений свойств воды и водяного пара по формулам, предложенным Международной Ассоциацией по Свойствам Воды и Водяного Пара. Термодинамические свойства вычисляются по формуляции 1997 для технических расчетов, а остальные свойства – по соответствующим им формуляциям.

В пакете WaterSteamPro, начиная с версии 6.0 доступны функции для расчета свойств газов. Функции предназначены для вычисления термодинамических свойств 11-ти, входящих в состав воздуха и продуктов сгорания, газов, а также их смесей, в идеальном состоянии при температурах от 200 до 2500 К.

Область применения функций для расчета свойств газов - это расчеты термодинамических свойств воздуха, продуктов сгорания и отдельных газов при умеренных давлениях (т.к. газы рассматриваются как идеальные) в диапазоне температур от 200К до 2500К. Смеси газов также рассматриваются как идеальные. Пакет программ WaterSteamPro официально зарегистрирован в Российском Агенстве по Патентам и Товарным Знакам (РОСПАТЕНТ), свидетельство №2000610803 от 25.08.2001.

Госстандартом России выдано свидетельство № АК-35/4 от 16.04.2001 о том, что программа WaterSteamPro воспроизводит величины, соответствующие данным, рекомендованным Государственной службой стандартных справочных данных (ГСССД Р-776-98) и уравнениям "IAPWS Industrial Formulation 1997 for the Thermodynamic Properties of Water and Steam" ("Система уравнений Международной ассоциации по свойствам воды и водяного пара для вычисления термодинамических свойств воды и водяного пара в промышленных расчетах 1997 года").

Программа WaterSteamPro рекомендована Департаментом генеральной инспекции по эксплуатации электрических станций и сетей Российского акционерного общества энергетики и электрофикации "ЕЭС России" для использования в энергетике (информационное письмо № ИП-14-27-2001 от 03.08.2001).

Программа WaterSteamPro может быть подключена практически ко всем программным средам (Microsoft Excel, Mathcad, Fortran, C++, Visual Basic, Delphi и др.), используемых для теплотехнических расчетов.

WaterSteamPro – это функции, созданные на основе функций Международной Ассоциации по Свойствам Воды и Пара (МАСВП) –

International Association for Properties of Water and Steam (IAPWS). Теплофизические свойства рассчитываются по формуляции 1997 года, а остальные – по их собственным формуляциям.

В WaterSteamPro поддерживаются основные технологии Windows: Win dll (32-бит. и 64-бит.) и ActiveX (32-бит. и 64-бит.). Во всех программах, которые поддерживают данные технологии можно использовать функции WaterSteamPro.

WaterSteamPro включает в себя примеры в Microsoft Excel, Mathcad, Visual Basic, Windows Scripting Host. Это показывает, что доступ к функциям возможен в совершенно различных программах (даже в AutoCAD 2000, в который встроена поддержка VBA - Visual Basic for Applications).

WaterSteamPro для пользователей Mathcad – это DLL, написанная по технологии User EFI. Это позволяет использовать функции WaterSteamPro аналогично встроенным функциям пакета Mathcad: например, вставлять в документ через диалог "Insert Function".

WaterSteamPro для программистов на Fortran, C/C++, Delphi, Visual Basic, .Net – это Win32-dll (32-бит. и 64-бит.) или ActiveX-component (32-бит. и 64-бит.).

WaterSteamPro для пользователей Microsoft Excel (32-х и 64-битных версий) – это XLL-дополнение (add-in) для Excel, что позволяет вставлять функции WaterSteamPro через диалог "Вставка функции" и использовать их аналогично встроенным функциям.

WaterSteamPro – это возможность использования в MATLAB (32-х и 64-битных версиях), Scilab (32-х и 64-битных версиях), Maple и т.д. [23].

1.3 Выводы и задачи исследования

По результатам анализа в первой главе можно сделать следующие выводы:

1) применение дифференциальной геометрии демонстрирует ясность и наглядность в решении задач, а термодинамика опирается на обобщение опытных фактов;

2) существует большое количество вычислительных продуктов, при помощи которых на основе уравнений состояний можно построить термодинамические поверхности.

Исходя из сделанных выводов можно в выпускной квалификационной работе поставить следующие задачи:

- рассмотреть методы дифференциальной геометрии в приложении к термодинамике, геометрические аксиомы, положения и вычислительные задачи термодинамики;

- выбрать программный продукт для реализации вычислительных экспериментов, разработать алгоритм на основе средств дифференциальной геометрии и провести вычислительные эксперименты;

- сформировать задачи перспективных исследований.

2 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ ГЕОМЕТРИИ В ТЕРМОДИНАМИКЕ

2.1 Аксиоматические методы в термодинамике

В настоящее время считается, что имеется несколько методов изложения термодинамических основ. К. Путилов говорит о пяти методах. Если к ним добавить подходы, предложенные А. Гухманом, А. Зоммерфельдом, М. Борном, Г. Фальком, а также другими авторами, то методов обоснования основ термодинамики свыше десятка. Однако в качестве основных целостных систем изложения термодинамики выделяют две: традиционную и аксиоматическую системы. Данные системы развиты в совокупность подходов, представлений и положений, которые общеприняты в научном сообществе [6].

В традиционной системе изложение материала ведется в следующей последовательности.

Первоначально вводятся основные термодинамические понятия: состояние тела, параметры состояния, эмпирическая и абсолютная температура, системы и шкалы измерения величин. Кроме того, дается понятие о термодинамическом процессе и осуществляется классификация процессов, освещаются представления об идеальном газе и приводятся основные законы идеального газа, установленные опытным путем. На основании обобщения фактов, полученных при опыте, формулируется первый постулат термодинамики – о существовании состояния термодинамического равновесия, а также принцип существования температуры как особой функции состояния равновесной системы (второй постулат термодинамики). На базе выдвинутых положений и закономерностей устанавливается связь между эмпирической и абсолютной температурами, обосновывается фундаментальность понятия абсолютной температуры. Приводятся определения количества теплоты и теплоемкости

как эмпирических величин, происходит обобщение основных соотношений и закономерностей на смеси идеальных газов и формулируются зависимости для термодинамических расчетов.

После этого формулируется закон сохранения и превращения энергии в общем виде и вводится понятие внутренней энергии и внешней работы. В заключение данного этапа записывается уравнение первого закона термодинамики в математической форме $dQ=du+dA$, где работа $dA=pdv$. Данное уравнение обобщается на общий случай термодинамических систем со многими параметрами:

$$dQ = du + pdv + \sum_{k=1}^n P_k dz_k. \quad (2.1)$$

Это позволяет развить представления о термических и калорических уравнениях состояния, связывающих между собой термодинамические параметры. Далее рассматриваются уравнения сохранения энергии применительно к разным процессам (изобарный, изохорный, изотермический) и различным физическим приложениям (течение различных сред в каналах, сжатие-расширение газов) [20].

Для обоснования второго закона термодинамики вводят определения теплового двигателя, рабочего тела, термодинамического цикла, горячего и холодного источника теплоты, термического коэффициента полезного действия. Кроме того, уделяют внимание понятиям термодинамики, связанным с обратимыми и необратимыми процессами, обсуждают проблему, дают общие формулировки второго закона термодинамики, которые давались различными авторами. Далее переходят к обоснованию понятия энтропии [18].

Определяя энтропию как сумму приведенных теплот, показывают, что интеграл Клаузиуса для любого обратимого цикла равен нулю:

$$\oint \frac{dQ}{T} = 0. \quad (2.2)$$

Это позволяет представить изменение энтропии в обратимых и необратимых процессах в виде: $ds=dQ/T$ и $ds\geq dQ/T$. Изложенные положения позволяют объединить уравнения первого и второго законов термодинамики в одно фундаментальное соотношение вида:

$$T \cdot ds \geq du + p \cdot dv + \sum_{k=1}^n P_k dz_k. \quad (2.3)$$

Представление материала заканчивают формулировкой наиболее важных дифференциальных уравнений термодинамики, используя математический аппарат функций нескольких переменных: дифференциальных уравнений для внутренней энергии, теплоемкостей, энтальпии, уравнений Максвелла. Далее переходят к вопросам технической термодинамики: изучению термодинамических свойств веществ, анализу термодинамических процессов.

Традиционная система связана с феноменологическими закономерностями, полученными на основе опытных данных, и общими представлениями о работе тепловых машин. Такой подход располагает физической ясностью и позволяет показать простоту термодинамических положений.

Аксиоматическая система изложения термодинамики до определенного момента представления материала имеет связь с традиционной системой. Первоначально определяется смысловое содержание основных понятий и определений: термодинамическая система, состояние и параметры состояния системы, термодинамические процессы и их виды, приводятся постулаты термодинамики для обоснования понятия температуры, формируются представления об эмпирической температуре. После этого обобщаются эмпирические характеристики и закономерности, полученные в опытах: уравнения состояния, законы Шарля, Гей-Люссака, Клапейрона-Менделеева. Далее приводится уравнение закона сохранения и превращения энергии, которое представляется в виде $dQ=du+p dv$. С учетом полного дифференциала энергии

$$du = (\partial u / \partial v)dv + (\partial u / \partial \vartheta)d\vartheta, \quad (2.4)$$

где ϑ – эмпирическая температура, элементарное приращение тепла представимо в виде:

$$dQ = C(\vartheta/v)d\vartheta + P(\vartheta/v)dv. \quad (2.5)$$

С этого места изложения термодинамических основ наблюдаются отличия в содержании материала. Далее используют подход, предложенный К. Каратеодори.

Каратеодори постулировал адиабатическую недостижимость как универсальное свойство всех физических систем и доказал справедливость теоремы: если в окрестности некоторой точки n -мерного пространства существуют точки, не достижимые без нарушения уравнения

$$\sum_{k=1}^n P_k(z_1, \dots, z_n)dz_k = 0, \quad (2.6)$$

то это уравнение голономно и для него существует интегрирующий делитель. После этого Каратеодори показывает, что интегрирующим делителем уравнения (2.6) для элементарного количества теплоты является абсолютная температура в виде универсальной функции эмпирической температуры. Общий интеграл уравнения Пфаффа $\Phi(z_1, \dots, z_n)$ для количества теплоты определен как энтропия термодинамической системы, т.е.

$$ds = \frac{dQ}{T}, \quad \lambda = T. \quad (2.7)$$

Таким образом, существуют две основные системы изложения основ термодинамики. Традиционный подход изначально был предложен Клаузиусом и другими классиками термодинамики. Аксиоматическая система изложения основ термодинамики введена в науку К. Каратеодори и его последователями. Первую систему критикуют за тесную связь с процессами работы тепловых машин, противоречивость некоторых положений и недостаточную выразительность математического формализма. Вторую систему изложения критикуют за абстрактность и формально

математический подход к установлению термодинамических понятий, который нарушает физическую ясность и простоту основных положений. С точки зрения обоснования фундаментальности метода термодинамики, вторая система изложения более предпочтительна, несмотря на то, что она упускает физическое содержание некоторых используемых принципов.

Аксиоматический метод является одним из способов дедуктивного построения научных теорий. Его методология предполагает, что первоначально приводятся основные исходные понятия и их определения. Далее выбирается ограниченное количество принимаемых без доказательств утверждений – аксиом или постулатов. Все исходные понятия, аксиомы и постулаты основываются на опытных данных и считаются истинными в силу их очевидности. После этого формулируются основные приемы исследования, логические формы и правила вывода положений теории (методов), позволяющие поочередно выводить одни утверждения и суждения из других. На основе аксиом и принятых методов все остальные положения теории получаются путем доказательства теорем и развития исходных положений и утверждений [10].

Аксиоматизация осуществляется после того, как содержательно теория уже в достаточной мере развита и построена, и основные положения сопоставлены с опытными фактами. Процесс аксиоматизации теории протекает быстро, если объем исходного знания достигает необходимого уровня и феноменологически и аналитически теория уже сформирована.

Процесс аксиоматизации науки в термодинамике длится более ста лет. Цель аксиоматики термодинамики заключается в определении основных понятий, установлении закономерностей и фундаментальных термодинамических законов.

Множество подходов в области аксиоматизации термодинамики указывает на то, что аксиоматическое направление в этой науке находится на этапе становления. Следует отметить, что аксиомы должны отражать

действительный мир опыта. Энтропия, в отличие от температуры, количества теплоты и вероятности событий, в опыте не определяема и не измеряема.

Практический опыт аксиоматизации термодинамики показывает, что понятию энтропии как одному из исходных принципов уделяется первостепенное значение. Например, аксиоматическая система А. Зоммельфельда постулирует все основные феноменологические и теоретические положения термодинамики. Основные приемы исследования и правила вывода фундаментальных положений теории (методы) не аксиоматизируются, а декларируются, т.к. они не очевидны из данных опыта, а получены в рамках предыдущего феноменологического развития термодинамики. Все это не позволяет последовательно выводить одни утверждения из других.

Аксиоматическая система А. Гухмана по содержанию близка, описанной выше системе А. Зоммельфельда. Однако, предварительно автор уделяет значительное внимание исходным определениям и понятиям: термодинамическая система, термодинамическое равновесие, состояние системы и ее параметры, пространство состояний и его координаты. Понятийно-категорийный аппарат в варианте развития теории у А. Гухмана достаточно хорошо и ясно проработан. На основании данных понятий вводится ряд постулатов, которые в своей сущности близки к постулатам системы Зоммерфельда, хотя и имеют свои особенности изложения.

А. Гухман уделил внимание вопросам аксиоматизации термодинамики, но в отличие от К. Каратеодори ему не удалось доказать справедливость фундаментальной зависимости второго начала $dQ=T \cdot ds$, в связи чем пришлось постулировать данное соотношение. Кроме этого не раскрыта математическая суть понятия энтропии как функции состояния и общего интеграла. Предложенная система обоснования термодинамики страдает нарушением последовательности выводов и очевидности основных положений.

Иной подход к аксиоматике термодинамики, близкий к методам математической аксиоматики был дан в работах К. Каратеодори, Н. Шиллера Г. Фалька и других авторов. Шиллер сформулировал девять положений и пришел к необходимости анализа многомерного дифференциального уравнения:

$$Z_0 dz_0 + Z_1 dz_1 + \dots + Z_n dz_n = 0, \quad (2.8)$$

которое характеризует процесс адиабатических изменений системы, где z_k – параметры состояния, Z_k – функции параметров. После этого проводилось исследование наличия или отсутствия общего интеграла уравнения (2.8). Принятые автором постулаты не были очевидными, и Шиллеру не удалось обосновать принцип существования энтропии последовательным выводом утверждений и положений.

При формулировке теории на основе линейных дифференциальных форм Г. Фальк исходил из суждения, что классическое построение термодинамики является не строгим и не соответствует требованиям, которые предъявляет аксиоматический метод. Он подмечал, что уравнение сохранения энергии в виде $dQ=du+dA$ относится к процессам, а не к состояниям, т.е. речь идет о функциях на многообразии кривых – функциях, аргументами которых служат кривые пространства состояния. В свою очередь, функции состояния соответствуют полным дифференциалам. Он приходит к важному выводу, что формулировка первого начала термодинамики оказывается связанной с понятием непрерывного пространства состояний термодинамических систем. При математическом построении теории необходимо не только применение непрерывного пространства состояний в качестве основного понятия, но и решение проблемы абстрактного и физического распознавания процессов (функций процессов), с которыми связана термодинамика. Этим подчеркивается существование математических и физических особенностей решаемой задачи.

Фальк и Юнг пошли по пути нового построения теории, основанной не на аксиоматизации основных начал термодинамики, а на использовании закономерностей линейных дифференциальных форм в многомерных пространствах.

Аксиоматизация термодинамики проводится различными способами, как в отношении формулировки аксиом, так и выбора основных понятий и определений. Один из успешных подходов предложил К. Каратеодори, который основан на аксиоматизации первого и второго начал термодинамики, но в математически строгой форме, нежели в традиционной системе изложения термодинамики. Также хочется отметить, что предложенная система не обладает простотой и отличается высокой степенью абстрактности.

При формулировке теории К. Каратеодори использует ряд общепринятых определений и вводит несколько новых: эквивалентности систем, тождественности систем, характеристики изменений состояний. Далее формулируются две основные аксиомы как обобщения опытных данных для простых систем [11].

Каратеодори поставил вопрос об условиях, при которых возможно представление дифференциала приращения теплоты dQ в форме $dQ=T \cdot ds$, где T является интегрирующим делителем, а величина ds – полным дифференциалом. Для этого он доказал лемму из теории пфаффовых уравнений: если в окрестности любой точки n -мерного пространства есть точки, не достижимые вдоль кривых, удовлетворяющих уравнению

$$Z_1 dz_1 + Z_2 dz_2 + \dots + Z_n dz_n = 0, \quad (2.9)$$

то уравнение вида

$$dQ = Z_1 dz_1 + Z_2 dz_2 + \dots + Z_n dz_n \quad (2.10)$$

голономно, и для левой части уравнения существует множитель, обращающий его в полный дифференциал.

В аксиоматическом направлении учения об энтропии задача обоснования существования энтропии вполне решена. При этом к полученному математическому доказательству никакие физические гипотезы, кроме постулата адиабатической недостижимости, не приводятся.

Слабым местом аксиоматики К. Каратеодори, как отмечал Планк, является принцип адиабатической недостижимости. По его словам проблема адиабатической недостижимости никогда не была предметом специального изучения, и никто не проводил соответствующих экспериментов. В настоящее время объем опытных данных недостаточен для признания постулата адиабатической недостижимости универсальным физическим принципом.

К анализу работ Каратеодори обращалась Т. Афанасьева-Эренфест, которая выдвинула свою систему обоснования второго начала термодинамики, близкую по методике изложения к аксиоматическому подходу. На основе исследований автор раскрыла логическую противоречивость формулировок второго закона, данных Клаузиусом и Кельвином. Основной вывод – существование энтропии и абсолютной температуры не зависит от необратимости реальных процессов и само существование энтропии как функции состояния недостаточно для обоснования ее возрастания.

Свою систему обоснования Афанасьева-Эренфест формирует путем использования общепринятых понятий: параметры системы, равновесное состояние, квазистатический процесс, адиабатический процесс, переходы между состояниями, количество теплоты, температура.

Суть большинства аксиоматических подходов заключается в том или ином способе использования закона сохранения энергии или термодинамической формы уравнения закона сохранения энергии. Во всех имеющихся системах с этим связано принятие основного постулата или аксиомы. Однако, данное положение по своей сути не является аксиоматическим, т.к. несет в себе закономерности обоснованные как

экспериментом и практическим опытом, так и логикой и теорией термодинамики. Аксиомы, связанные со вторым началом менее очевидны, так как доля логических обоснований в них существенно больше, а с опытом сопоставляются не сами исходные аксиомы, а логические и теоретические следствия, которые с ними связаны.

При построении аксиоматики термодинамики важным является использование пространства состояний термодинамических систем в виде непрерывной многомерной модельной среды. Если рассматривать параметры состояния термодинамической системы, как декартовы координаты, то подобная модельная среда будет изображена в виде многомерного пространства n -измерений.

Тогда состояние термодинамической системы будет отображаться многомерной точкой, а процесс изменения состояния – многомерной кривой. При этом следует учитывать в процессе моделирования два аспекта проблемы – математическое и физическое содержание научной задачи.

В первом случае любые изменения состояния термодинамической системы в многомерном пространстве состояний являются равновозможными, и на осуществление состояний и процессов не накладывается никаких ограничительных условий. Даже процесс, который осуществляется с точки, лежащей на характеристической поверхности уравнения состояния для конкретного вещества, в область вне этой поверхности, абстрактно возможен.

Во втором случае множество всех состояний системы будет отображать только физически возможные состояния и процессы, которые могут быть ограничены условиями существования и осуществления и которые будут привязаны к определенным характеристическим поверхностям или кривым. Такие условия должны учитывать физику термодинамических процессов и явлений и отражать ее в особенностях процесса моделирования и представления многомерных точек состояний и кривых процессов.

Таким образом, одно из основных противоречий термодинамики связано с нелогичным использованием вероятностных принципов в термодинамике и заключается в том, что энтропия может быть определена в виде статистической энтропии в представлениях Больцмана-Планка и в виде термодинамической энтропии в представлениях Клаузиуса.

Следовательно, важным является определение на макроуровне вероятности состояния для случая многомерного пространства состояний термодинамических систем. При решении этой проблемы видна явная необходимость изучения практического использования вероятностных принципов в термодинамике, которые позволили бы раскрыть сущность спорных вопросов и исключить ряд противоречий, затрагивающих основания данной науки.

2.2 Принятые гипотезы, геометрические аксиомы и положения термодинамики

Исходные положения термодинамики – первые из постулатов, лежащих в основе термодинамики. Они представляют собой результат обобщения экспериментальных фактов. Термин предложен И. П. Базаровым.

В 1925 г. Т. А. Афанасьева-Эренфест показала, что система законов термодинамики должна быть дополнена аксиомой о существовании термодинамического равновесия: «...всякое начальное состояние системы, представляющее нарушенное равновесие, приводит к равновесному состоянию» [4].

Первое исходное положение термодинамики – физический принцип, утверждающий, что вне зависимости от начального состояния изолированной системы в итоге в ней установится термодинамическое равновесие.

При этом термодинамическое равновесие транзитивно, то есть если система 1 будет находиться в термодинамическом равновесии с системой 2, а 2 с системой 3, то система 1 будет находиться в равновесии с 3. Все три системы можно считать как отдельными системами, так и частями одной равновесной системы [26].

Постулаты (аксиомы) первого начала термодинамики:

1) энергия не исчезает и не возникает вновь, она лишь переходит из одного вида в другой в различных физических и химических процессах;

2) осуществление вечного двигателя первого рода невозможно;

3) энергия изолированной системы тел сохраняется при всех процессах, происходящих в системе: она может лишь передаваться от одних тел другим (с сохранением или изменением формы движения материи);

4) в термодинамическом процессе подведенная теплота в общем случае расходуется на изменение его энергии и совершение работы;

5) любое взаимодействие имеет своим необходимым следствием изменение внутренней энергии системы на величину, равную количеству воздействия;

6) энергия является однозначной функцией состояния и не зависит от пути перехода системы из одного состояния в другое;

7) бесконечно малое изменение внутренней энергии является полным дифференциалом.

В 1931 году Р. Фаулер в ходе дискуссии с индийским астрофизиком Саха и его сотрудником Зривартава сформулировал аксиому о существовании температуры; постулат, за которым после выхода монографии Р. Фаулера и Э. Гуггенгейма закрепилось неудачное название «нулевое начало термодинамики» (англ. zeroth law), поскольку данный закон оказался на тот момент хронологически последним из нумерованных законов термодинамики.

Второе исходное положение термодинамики: всякая равновесная система характеризуется температурой – физической величиной, описывающей внутреннее состояние этой системы.

Две системы, которые находятся в тепловом равновесии, будут иметь одинаковую температуру.

Также его можно сформулировать в следующем виде: в состоянии равновесия все внутренние термодинамические параметры системы характеризуется внешними параметрами и температурой [21].

Постулаты (аксиомы) второго начала термодинамики:

1) тепло не может переходить от холодного тела к теплему без компенсации (Клаузиус);

2) природа стремится к переходу от менее вероятных состояний к более вероятным (Больцман);

3) невозможно осуществление цикла теплового двигателя без переноса некоторого количества теплоты от источника тепла с более высокой температурой к источнику с более низкой температурой (Томпсон) [27];

4) невозможен процесс, имеющий единственным своим результатом превращение тепла в работу;

5) осуществление вечного двигателя второго рода не возможно (Оствальд);

6) наибольший коэффициент полезного действия тепловой машины не зависит от природы рабочего тела и вполне определяется предельными температурами, между которыми машина работает (Карно);

7) любой реальный самопроизвольный процесс является необратимым процессом;

8) энтропия всякой изолированной системы стремится в максимуму (Клаузиус);

9) энтропия является однозначной функцией состояния и не зависит от пути перехода системы из одного состояния в другое;

10) у всякой равновесной системы существует функция состояния – энтропия, которая не убывает при любых процессах в изолированных и адиабатно изолированных системах;

11) бесконечно малое изменение тепла при равновесном процессе, деленное на абсолютную температуру тела, является полным дифференциалом энтропии;

12) в любой окрестности произвольно заданного начального состояния имеются состояния, которые нельзя как угодно точно аппроксимировать адиабатическими изменениями состояния (аксиома Каратеодори) [1].

Можно сформулировать следующие гипотезы:

- 1) термодинамические состояния газов представляются в виде многомерных геометрических точек;
- 2) термодинамические процессы представляются двумерными или трехмерными кривыми;
- 3) уравнение состояния может быть представлено термодинамической поверхностью;
- 4) методы дифференциальной геометрии можно применить к гипотезам 1-3;
- 5) вычислительные программы могут быть применены для построения соответствующих геометрических объектов.

2.3 Вычислительные задачи термодинамики

На основе первого и второго законов термодинамики формулируется основное уравнение термодинамики, которое для равновесных процессов имеет вид:

$$T \cdot ds = du + p \cdot dv + \sum_{k=1}^n P_k dz_k, \quad (2.11)$$

а для неравновесных процессов записывается в форме неравенства:

$$T \cdot ds \geq du + p \cdot dv + \sum_{k=1}^n P_k dz_k. \quad (2.12)$$

Одно из основных соотношений термодинамики, которое связывает термодинамическую вероятность W с энтропией системы s , имеет вид:

$$s = k_* \cdot \ln W, \quad (2.13)$$

где k_* – постоянная Больцмана.

Данное соотношение указывает на то, что существует некоторая функция состояния, получаемая при помощи нелинейного преобразования распределения вероятности состояний системы. Например, для идеального газа подобное преобразование имеет вид уравнения (2.13). Данное уравнение выражает математически второе начало в формулировке Больцмана.

За термодинамическую вероятность обычно принимают относительную вероятность $W = P / P_0$, которая указывает во сколько раз математическая вероятность P данного макросостояния больше, чем математическая вероятность P_0 другого стандартного макросостояния. Принципом, который позволяет обосновать понятие термодинамической вероятности, является положение, что все микросостояния являются с математической точки зрения равновероятными.

Для подсчета термодинамической вероятности существуют разные подходы. Например, по методу Больцмана, если в системе N элементов (молекул), то число возможных перестановок как внутри групп элементов, так и между группами по теории сочетаний равно $N!$. Для определения вероятности W необходимо исключить перестановки, которые происходят внутри групп элементов:

$$W = \frac{N!}{\prod_i N_i!}, \quad (2.14)$$

где N – общее число элементов системы; i – количество групп элементов в системе; N_i – количество элементов в i -той группе.

Методы определения термодинамической вероятности основаны на гипотезах распределения молекул по фазовому пространству, которые отвечают основным термодинамическим представлениям о существовании и поведении вещества.

Ф. Верле отмечал явные недостатки понятия термодинамической вероятности, которая сводится к определению числа благоприятных случаев. Классическая вероятность представляет собой отношение наблюдаемых в опыте благоприятных исходов к общему числу всех возможных исходов. Исключение числа возможных случаев оправдано только, если это число постоянно, что как раз и имеет место в равновесном идеальном газе. Поэтому при использовании понятия термодинамической вероятности нет явно выраженной связи с наблюдаемыми событиями, как это принято в теории вероятности.

Критические замечания Ф. Верле затрагивают одну из главных проблем термодинамики и указывают на то, что понятие состояния термодинамической системы и вероятности состояния теоретически слабо проработано.

Справедливость соотношения Больцмана $s = k_* \cdot \ln W$ для других термодинамических систем, помимо идеального газа, остается открытым вопросом, который без привлечения эмпирических данных не может быть решенным [1].

Теоретической базой большинства дифференциальных уравнений термодинамики является теория дифференциальных пфаффовых форм и соотношения дифференцирования для уравнений нескольких переменных [13]. Термодинамические соотношения, устанавливающие связи между различными свойствами вещества, получают из основного уравнения термодинамики (2.11).

Из уравнений $du = T \cdot ds - p \cdot dv$, $dh = T \cdot ds + p \cdot dv$, можно получить уравнения Максвелла, которые имеют вид:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial T}{\partial v}\right)_s &= -\left(\frac{\partial p}{\partial s}\right)_v; \quad \left(\frac{\partial T}{\partial p}\right)_s = \left(\frac{\partial v}{\partial s}\right)_p; \\ \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v &= \left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_T; \quad \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_p = -\left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_T. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Здесь $h=u+p \cdot v$ – энтальпия.

Из этих же уравнений получают частные производные для энергии и энтальпии:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial u}{\partial s}\right)_v &= T; \quad \left(\frac{\partial u}{\partial v}\right)_s = -p; \\ \left(\frac{\partial h}{\partial s}\right)_p &= T; \quad \left(\frac{\partial h}{\partial p}\right)_s = v. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Уравнения для теплоемкостей имеют следующий вид:

$$c_v = T \cdot \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_v; \quad c_v = \left(\frac{\partial u}{\partial T}\right)_v; \quad (2.17)$$

$$c_p = T \cdot \left(\frac{\partial s}{\partial T}\right)_p; \quad c_p = \left(\frac{\partial h}{\partial T}\right)_p; \quad (2.18)$$

$$c_p - c_v = T \cdot \left(\frac{\partial p}{\partial T}\right)_v^2 \left(\frac{\partial v}{\partial T}\right)_v. \quad (2.19)$$

Изменение энтропии в термодинамических процессах характеризуется уравнениями Максвелла и соотношениями (2.17) и (2.18). Довольно часто используются также соотношения для энтропии, которые получаются из уравнения сохранения энергии:

$$\left(\frac{\partial s}{\partial v}\right)_u = \frac{p}{T}; \quad \left(\frac{\partial s}{\partial p}\right)_h = \frac{v}{T}. \quad (2.20)$$

Приведенные выше соотношения, дополненные методами определения термодинамической вероятности и целым рядом эмпирических закономерностей и уравнений состояний, образуют математический аппарат термодинамики, который является основным инструментом термодинамического анализа.

2.4 Выводы

По результатам выполненных исследований во второй главе можно сделать следующие выводы:

1) большую роль при аксиоматическом изучении объектов и отношений между ними уделяют разработке регулярных методов – алгоритмов, позволяющих по известным правилам решать вопросы, относящиеся к изучаемым объектам и отношениям;

2) принятые гипотезы, геометрические аксиомы и положения термодинамики являются мощным инструментом в построении термодинамической теории;

3) для изучения поверхности идеального газа средствами дифференциальной геометрии вычисляют термодинамические величины.

3 ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОГРАММЫ MATLAB ДЛЯ РЕШЕНИЯ ГЕОМЕТРИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ОПИСАНИЯ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ

3.1 Продукт MATLAB для решения задач

MATLAB – это высокоуровневый язык и интерактивная среда для программирования, численных расчетов и визуализации результатов. С его помощью можно анализировать данные, разрабатывать алгоритмы, создавать модели и приложения. Главное окно программы представлено в соответствии с рисунком 3.1.

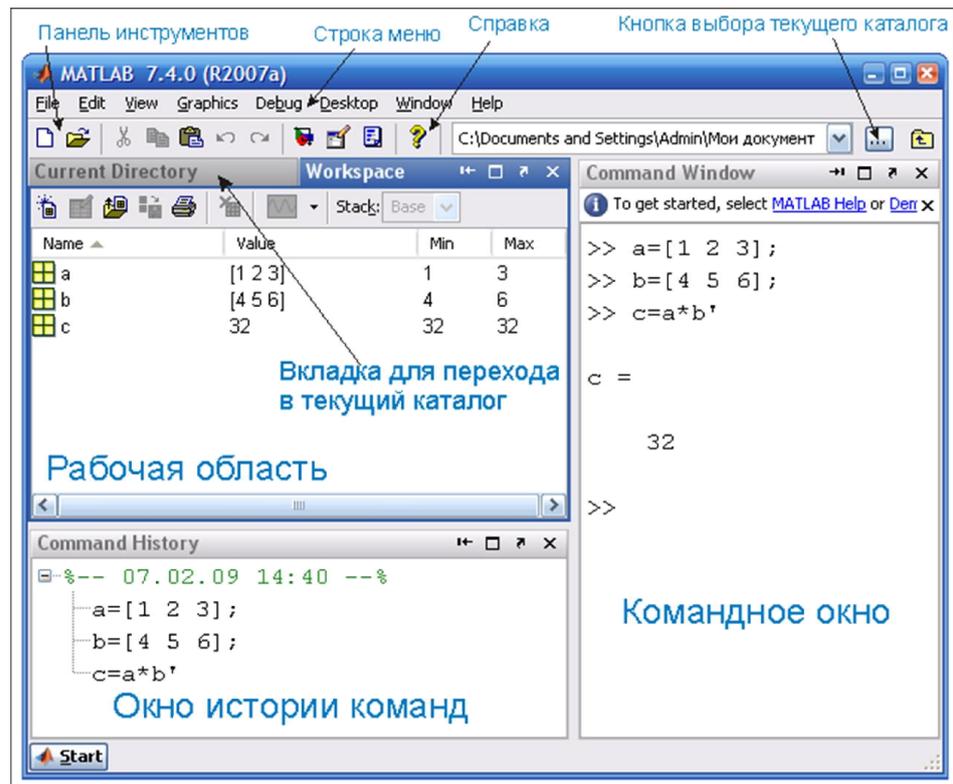


Рисунок 3.1 – Окно программы MATLAB

Язык, инструментарий и встроенные математические функции позволяют исследовать различные подходы и получать решение быстрее, чем при помощи электронных таблиц, традиционных языков программирования, таких как C/C++ или Java.

MATLAB широко используется в таких областях, как:

- обработка сигналов и связь;
- обработка изображений и видео;
- системы управления;
- автоматизация тестирования и измерений;
- финансовый инжиниринг;
- вычислительная биология;

Большинство инженеров и ученых по всем миру используют MATLAB в качестве языка технических вычислений. Этот язык в отличие от традиционных языков программирования (C/C++, Java, Pascal, FORTRAN) позволяет сократить время решения типовых задач и упрощает разработку новых алгоритмов.

MATLAB представляет собой основу семейства продуктов MathWorks и является главным инструментом для решения большинства научных и прикладных задач в следующих областях: проектирование коммуникационных систем, финансовое моделирование, измерение сигналов и тестирование, моделирование объектов и разработка систем управления, обработка сигналов и изображений, вычислительная биология.

Программу MATLAB разработал Молер (С.В. Moler) в 70-х г. г. XX века, которая использовалась на больших ЭВМ. В начале 80-х г. г. Джон Литл из фирмы Math Works, Inc. модернизировал эту систему для персональных компьютеров типа IBM PC, VAX и Macintosh. После этого к расширению продукта были привлечены крупнейшие ученые и научные школы в математике, программировании и естествознании. Это сделало MATLAB признанным лидером в решении различных проблем науки и техники среди других подобных систем.

Ядро этой программы позволяет просто работать с матрицами реальных, комплексных и аналитических типов данных и со структурами данных и таблицами поиска [28].

MATLAB имеет встроенные функции базовой статистики и численного решения дифференциальных уравнений, функции для работы с полиномами, функции линейной алгебры (LAPACK, BLAS), быстрого преобразования Фурье (FFTW); расширенные математические библиотеки для Intel MKL. Например, для нахождения производной символьного выражения, используют следующие формы функции diff:

diff(Z) дифференцирует символьное выражение Z по свободной переменной;

diff(Z, k) дифференцирует символьное выражение Z по переменной k;

diff(Z, n) дифференцирует n раз символьное выражение Z;

diff(Z, k, n) дифференцирует n раз символьное выражение Z по переменной k;

diff без аргументов дифференцирует предшествующее выражение[30].

Также для решения дифференциальных уравнений в MATLAB зарезервирована функция dsolve, которая имеет следующие форматы обращения:

1. $y=dsolve('Dy(x)')$, где Dy(x) – уравнение; y – возвращаемые функцией dsolve решения.

2. $y=dsolve('Dy(x)', 'HY')$, где Dy(x) – уравнение; HY – начальные условия. Первая производная функции обозначается Dy, вторая производная – D2y и так далее [31].

Все встроенные функции ядра MATLAB разработаны и оптимизированы специалистами и работают быстрее, чем их эквивалент на C/C++. Программа предоставляет множество методов для анализа данных, разработки алгоритмов и создания моделей. Продукт MATLAB содержит в себе математические функции для инженерных и научных операций. Встроенные математические функции используют процессор-оптимизированные библиотеки, которые предназначены для ускорения векторных и матричных вычислений.

Имеется доступ к следующим операциям:

- обыкновенные дифференциальные уравнения;
- интерполяция и регрессия;
- дифференцирование и интегрирование;
- Фурье анализ;
- системы линейных уравнений;
- собственные значения и сингулярные числа матриц;
- разреженные матрицы;

Расширения MATLAB предоставляют специализированный функционал в следующих областях: статистика, оптимизация, обработка сигналов, машинное обучение.

Программа располагает инструментами для получения, анализа и визуализации данных, которые позволяют исследовать проблему быстрее, чем с помощью электронных таблиц или традиционных языков программирования. Также можно документировать результаты в виде графиков, отчётов или публикации кода MATLAB.

Доступ к данным в программе позволяет получить доступ к данным из файлов, других приложений, баз данных, внешних устройств. Можно читать данные из файлов таких известных форматов как Microsoft Excel, текстовых или двоичных файлов, изображений, аудио и видео файлов, научных форматов (HDF и netCDF). Функции ввода-вывода позволяют работать с файлами данных любых форматов [28].

Используя расширения MATLAB можно получать данные с различных устройств, таких как последовательный порт компьютера, звуковая карта, а также потоковые данные в режиме реального времени с измерительных устройств для анализа и визуализации. Также можно управлять такими приборами, как осциллографы, анализаторы сигналов и генераторы колебаний специальной формы.

Анализ данных MATLAB позволяет управлять, фильтровать и осуществлять предварительную обработку данных. Помимо того, можно исследовать данные для нахождения трендов, проверки гипотез, построения

описательных моделей. В этом продукте включены функции для фильтрации, сглаживания, свёртки и быстрого преобразования Фурье (FFT). Продукты-расширения включают в себя возможности подбора кривых и поверхностей, многомерной статистики, спектрального анализа, анализа изображений, идентификации систем и другие инструменты анализа.

Визуализация данных MATLAB располагает набором встроенных функций построения 2D и 3D графиков, а также функциями объёмной визуализации. Можно использовать эти функции для визуализации и в качестве средства представления обрабатываемой информации. Графики можно задавать как интерактивно, так и программно. В галерее графиков есть примеры множества способов представления данных графически. Для каждого примера можно посмотреть и скачать исходный код для использования в приложениях.

Язык MATLAB имеет поддержку матричных и векторных операций, необходимых для решения инженерных и научных задач, и предназначенных для быстрой разработки и запуска. С помощью этого продукта можно писать программы и алгоритмы быстрее, чем на традиционных языках программирования, так как нет необходимости в следующих низкоуровневых организационных операциях: объявление переменных, определение типов и выделение памяти. В большинстве случаев переход на векторные и матричные операции избавляет от необходимости использования циклов `for`. В результате одна строка кода может заменить несколько строк C/C++ кода.

MATLAB обладает свойствами традиционных языков программирования, включая управление потоками данных, обработку ошибок и объектно-ориентированное программирование (ООП). Можно использовать основные типы данных, сложные структуры данных или определять пользовательские типы. Выполнение команды по одной за раз позволяет быстро исследовать различные варианты для получения лучшего решения. При объединении интерактивных команд в скрипт или функцию можно автоматизировать их выполнение [29].

Расширения MATLAB содержат встроенные алгоритмы для обработки изображений и видеоданных, обработки сигналов и связи, систем управления и многих других областей. Комбинируя эти алгоритмы в своем решении, можно реализовать сложные программы и приложения.

Таким образом, MATLAB – чрезвычайно мощный инструмент, помогающий разработчикам создавать приложения с графическим интерфейсом, предназначенные для выполнения математических вычислений. Он обладает развитыми возможностями интерпретации двумерных и трехмерных массивов данных, имеет встроенный язык программирования, который вобрал в себя преимущества традиционных языков и позволяющий сравнительно легко создавать собственные программы.

3.2 Подпрограммы, описание функций

Поверхность идеального газа задается уравнением $-z+x*y/R=0$. Для азота $R=297$.

Уравнение касательной в общем виде выглядит следующим образом:

$$z - z_0 = f'_x(x_0, y_0, z_0)(x - x_0) + f'_y(x_0, y_0, z_0)(y - y_0). \quad (3.1)$$

Далее находим частные производные функции $f(x, y, z) = -z+x*y/297$.

Поскольку функция задана в неявном виде, то производные ищем по формуле:

$$\frac{\partial z}{\partial x} = - \frac{\frac{\partial F(x, y, z)}{\partial x}}{\frac{\partial F(x, y, z)}{\partial z}}, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial z}{\partial y} = - \frac{\frac{\partial F(x, y, z)}{\partial y}}{\frac{\partial F(x, y, z)}{\partial z}}. \quad (3.3)$$

Для нашей функции получаем:

$$\frac{\partial F(x,y,z)}{\partial x} = \frac{y}{297},$$

$$\frac{\partial F(x,y,z)}{\partial y} = \frac{x}{297},$$

$$\frac{\partial F(x,y,z)}{\partial z} = -1.$$

Тогда:

$$\frac{\partial z}{\partial x} = -\frac{\frac{y}{297}}{-1},$$

$$\frac{\partial z}{\partial y} = -\frac{\frac{x}{297}}{-1}.$$

В точке $M_0(35,11,55)$ значения частных производных:

$$f'_x(35;11;55) = 11/297;$$

$$f'_y(35;11;55) = 35/297.$$

Пользуясь формулой, получаем уравнение касательной плоскости к поверхности в точке M_0 :

$$z - 55 = 11/297(x - 35) + 35/297(y - 11)$$

или

$$z = 11/297(x - 35) + 35/297(y - 11) + 55.$$

Уравнение нормали имеет следующий вид:

$$\frac{x - x_0}{f''_x(x_0,y_0)} = \frac{y - y_0}{f''_y(x_0,y_0)} = \frac{z - z_0}{-1}. \quad (3.4)$$

В параметрическом виде будет иметь следующую запись:

$$\begin{cases} x = f'_x \cdot t + x_0; \\ y = f'_y \cdot t + y_0; \\ z = f'_z \cdot t + z_0. \end{cases} \quad (3.5)$$

Подставив наши значения в уравнение получим:

$$\begin{cases} x = 11/297 \cdot t + 35; \\ y = 35/297 \cdot t + 11; \\ z = -t + 55. \end{cases} \quad (3.6)$$

Пользуясь формулой, получаем канонические уравнения нормали к поверхности в точке M_0 :

$$\frac{x - 1}{1/297} = \frac{y - 1}{1/297} = \frac{z - 1}{-1}.$$

При реализации программы использованы следующие встроенные функции MATLAB:

`Mesh ()` – соединяет друг с другом все соседние точки поверхности графика отрезками прямых и показывает в графическом окне плоскую проекцию объемного тела. Каркасно-ребристое тело состоит из четырехугольных граней белого цвета, а ребра граней окрашиваются в разные цвета. По умолчанию более высоким точкам графика соответствуют красные цвета, а более низким (меньшие значения третьей координаты) – темно-синие. Промежуточные области окрашиваются в зеленые, светло-синие и желтые цвета.

`Plot3 ()` – проектирует соответствующую трехмерную линию на плоскость и строит результирующее изображение. Позволяет выделить график функции $z(x, y)$, указав способ отображения линии, способ отображения точек, цвет линий и точек с помощью строковой переменной s , которая может включать до трех символов.

`Ezplot3 ()` – строит трехмерный график функции, заданной параметрически уравнениями $x(t)$, $y(t)$, $z(t)$ при изменениях аргумента t от t_{\min} до t_{\max} .

Функция `ezplot()` применяется для рисования графиков неявно заданных функции трех переменных и параметрически заданных функций.

Эта функция рисует также графики функций одной переменной, шаг и нужные массивы значений абсцисс и ординат создаются автоматически.

Получившиеся коды программы приведены в приложениях А-В.

3.3 Реализация вычислительных экспериментов

Практическая реализация в MATLAB для азота, водорода, воздуха представлена на рисунках 3.2-3.4:

Красным цветом изображена нормаль, зеленым цветом – касательная плоскости.

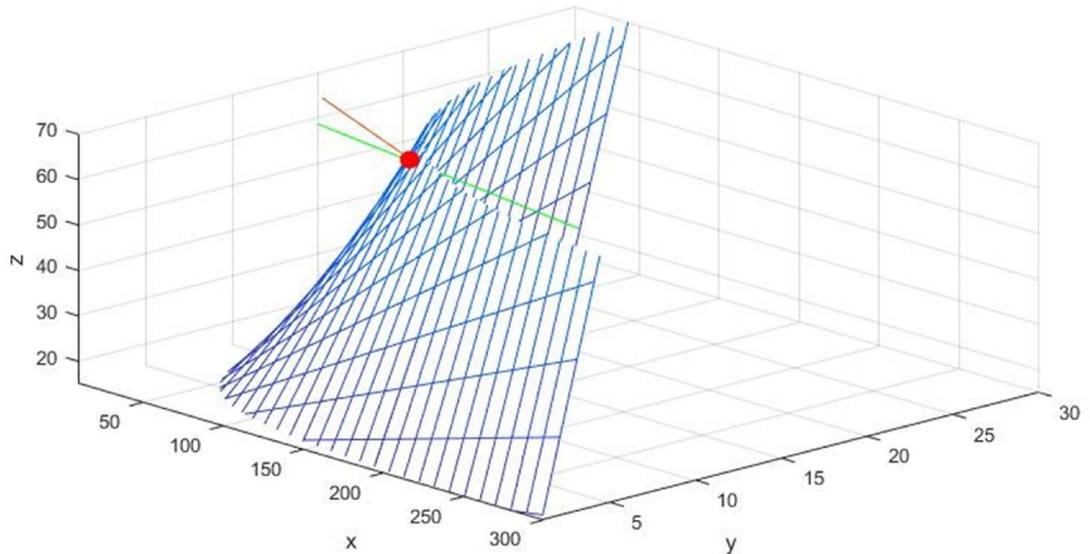


Рисунок 3.2 – Геометрическая поверхность идеального газа (азот)

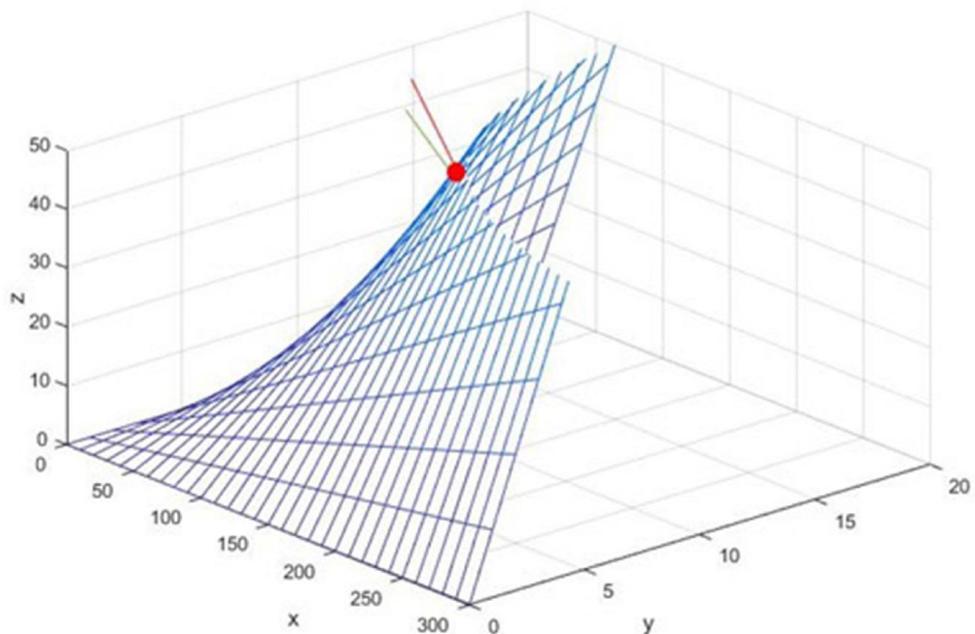


Рисунок 3.3 – Геометрическая поверхность идеального газа (водород)

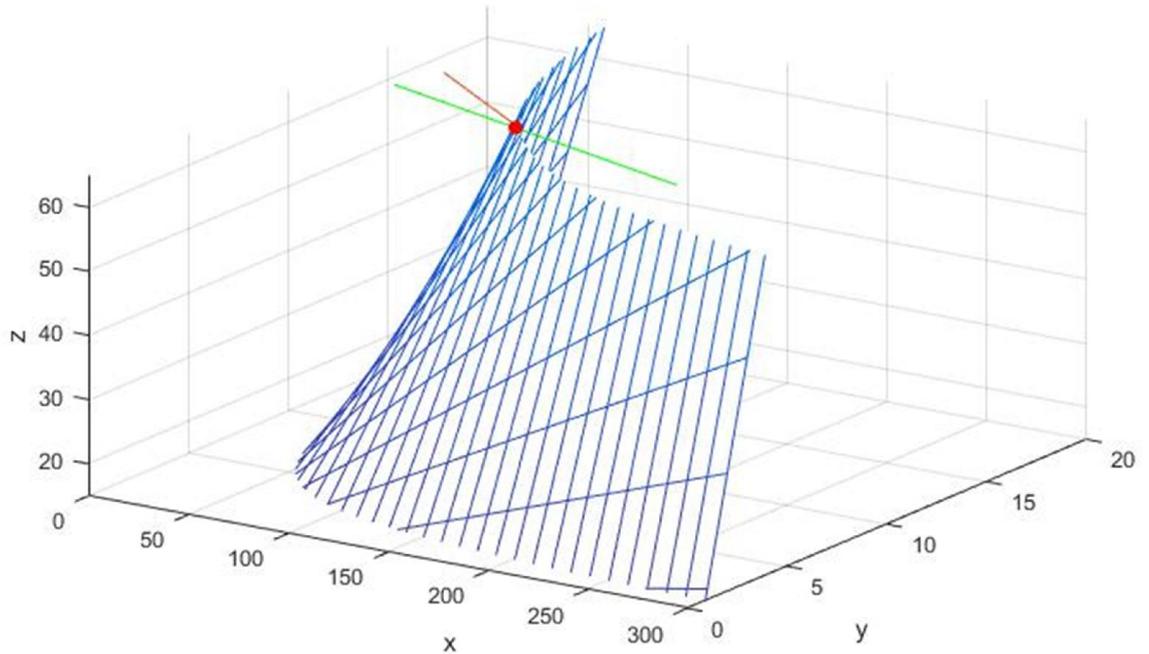


Рисунок 3.4 – Геометрическая поверхность идеального газа (воздух)

3.4 Выводы

По результатам проведенных исследований в третьей главе можно сделать следующие выводы:

- 1) программа MATLAB обладает мощным набором инструментов, которые можно использовать для решения геометрических задач;
- 2) система MATLAB содержит большое количество встроенных функций, при помощи которых можно построить геометрические объекты, такие как нормаль, касательная, поверхность;
- 3) вычислительные эксперименты показали, что при построении поверхностей идеальных газов в среде MATLAB можно наглядно увидеть состояние системы в геометрическом представлении.

4 ПОСТАНОВКА ЗАДАЧ ПЕРСПЕКТИВНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

Для обозначения одного из вариантов единой теории поля, последовательно сводящий все физические объекты к геометрическим Дж. Уиллер ввёл термин геометродинамика.

Сущность ее заключается не только в том, чтобы состояние физических систем изображать с помощью геометрических образов. Эти образы не являются самоцелью, они представляют собой предмет исследования. Так как эти геометрические образы имеют определенный физический смысл и изображают реальные соотношения между материальными телами, их геометрическое исследование приводит к таким геометрическим же положениям, которые также имеют определенный физический смысл, т. е. выражают собой определенные законы природы.

Построение геометродинамики осуществляется в несколько этапов.

Выделяют четыре этапа становления геометродинамики (Латыпов и др., 2001).

Первый этап заключается в единой теории гравитации и электромагнетизма на основе общей теории относительности. Основная задача геометродинамики на этом этапе в упрощённой постановке состоит в следующем. По заданной метрике пространства-времени, которая является решением уравнения Эйнштейна, через тензоры кривизны и энергии-импульса электромагнитного поля в вакууме получить тензор электромагнитного поля в вакууме, удовлетворяющий уравнениям Максвелла (Эйнштейн, 1965).

Второй этап строится на теории элементарных частиц. Моделью пары взаимодействующих частиц считается так называемая "ручка", простейшим видом которой является одна из топологических интерпретаций максимального аналитического продолжения поля Шварцшильда.

Характеристиками элементарной частицы (заряда) являются некоторые интегральные инварианты "ручки". Пространство-время в

геометродинамике многосвязное. Вводится понятие геона – сгустка того или иного излучения концентрации, достаточной, чтобы соответствующее искривление пространства сделало этот сгусток метастабильным (т.е. существующим долгое время). В геометродинамике предсказываются электромагнитные, нейтринные и гравитационные геоны. Понятие геона является классическим. Считается, что квантовый аналог понятия "геон" представляет собой геометродинамическое описание массы элементарных частиц (экспериментально геоны не наблюдались) (Уиллер, 1970).

На третьем этапе строится теория сплошных сред, приводящая в общих чертах к тем же результатам, что и в обычной теории относительности. Предполагается, что в геометродинамике должен нарушаться закон сохранения барионного заряда. В качестве конкретного механизма этого нарушения можно рассматривать процесс гравитационного коллапса и последующего испарения чёрных дыр (Уиллер, 1970).

На заключительном этапе делаются попытки построить последовательную квантовую геометродинамику. Рассматриваются квантовые флуктуации метрики, причём указывается, что на 10^{-33} см флуктуации могут существенно изменять топологию пространства.

В настоящее время главным источником проблем является сложность самого изучаемого объекта. Глубина этих проблем такова, что приводит к изменению стрелы познания. Если раньше вся сложность системы сводилась только лишь к большому числу достаточно простых её частей, то уже на уровне кварков двигаться в этом направлении оказалось невозможным. Бесцветные кварковые системы нельзя представить в виде набора отдельных элементов и относительно слабых связей между ними во всём энергетическом диапазоне. Невозможность разбиения означает необходимость изучения сложных структур на уровне целостной системы вакуума" (Латыпов и др., 2001) [14].

По словам А. Эйнштейна «Термодинамика – это единственная физическая теория универсального содержания, относительно которой я

убежден, что в рамках применимости её основных понятий она никогда не будет опровергнута».

В свою очередь, к термодинамике могут быть применены основные положения многомерной евклидовой дифференциальной геометрии, которая является составной частью геометродинамики.

Используя метод характеристик из Кошлякова, нами было выполнено вычисление для нахождения угла между нормалью и касательной плоскостью. В дальнейшем планируется реализация этого алгоритма в программе MATLAB.

Математическое решение

$$\frac{p}{2} \frac{\partial \omega}{\partial p} + \frac{v}{2} \frac{\partial \omega}{\partial v} = T.$$

Характеристика:

$$\frac{dp}{\frac{p}{2c_p}} = \frac{dv}{\frac{v}{2c_v}} = \frac{d\omega}{T} = c_l \frac{dT}{T} \quad (d\omega = c_l dT).$$

$$\vec{n} \perp \text{касательной плоскости к поверхности } T - \frac{pv}{R_i} = 0.$$

$$\vec{n} (F'_p; F'_v; F'_T) = \left(-\frac{v}{R_i}; -\frac{p}{R_i}; 1\right).$$

$$2c_p \frac{dp}{ds} = p.$$

$$\frac{dp}{p} = \frac{1}{2c_p} ds, \ln p = \frac{1}{2c_p} s - s_0, p = p_0 l^{\frac{1}{2c_p} s}.$$

$$\text{Аналогично, } v = v_0 l^{\frac{1}{2c_v} s} \text{ из } 2c_v \frac{dv}{ds} = v.$$

$$\frac{d\omega}{ds} = T, \frac{d\omega}{ds} = \frac{p_0 v_0}{R_i} l^{\frac{s}{2} \left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} = T_0 l^{\frac{s}{2} \left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)}.$$

Интегрируем по s

$$\omega = \frac{p_0 v_0}{R_i} \frac{2}{\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} l^{\frac{s}{2} \left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} + c, \omega_0 = T_0 \frac{2}{\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} + c \text{ (при } s=0\text{)}.$$

$$\text{Вычислим } c: c = \omega_0 - T_0 \frac{2}{\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)}.$$

$$\omega = T_0 \frac{2}{\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} l^{\frac{s}{2}\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} + \omega_0 - T_0 \frac{2}{\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)}.$$

$$\vec{n} = \left(-\frac{v_0 l^{\frac{1}{2c_v}s}}{R_i}; -\frac{p_0 l^{\frac{1}{2c_p}s}}{R_i}; 1 \right).$$

$$\vec{s} = (p'_s; v'_s; \omega'_s).$$

$$p'_s(s_0) = \frac{l^{\frac{1}{2c_p}s_0}}{2c_p} p_0, \quad v'_s(s_0) = \frac{l^{\frac{1}{2c_v}s_0}}{2c_v} v_0, \quad \omega'_s(s_0) = \frac{l^{\frac{s}{2}\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)}}{R_i} p_0 v_0.$$

$$\vec{n}(s_0) = \left(-\frac{l^{\frac{1}{2c_v}s_0}}{R_i}; -\frac{l^{\frac{1}{2c_p}s_0}}{R_i}; 1 \right).$$

$$\vec{n} \cdot \vec{s} = -\frac{p_0 v_0}{2c_p R_i} l^{\frac{s}{2}\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} - \frac{p_0 v_0}{2c_v R_i} l^{\frac{s}{2}\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} + -\frac{p_0 v_0}{R_i} l^{\frac{s}{2}\left(\frac{1}{c_p} + \frac{1}{c_v}\right)} \neq 0,$$

так как $c_p \neq c_v \neq 1 \Rightarrow \cos(\vec{n}, \vec{s}) \neq 0 \Rightarrow$ характеристика \notin поверхности идеального газа.

В дальнейшем это поможет лучше и нагляднее представлять любой исследуемый процесс, понять какими свойствами он обладает. Кроме этого представление термодинамических положений при помощи геометрии сделает термодинамику более простой для понимания.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В ходе выполнения выпускной квалификационной работы решена научно-прикладная задача, целью которой было применить аппарат дифференциальной геометрии к термодинамике при построении термодинамических уравнений состояний, представляемых в пространстве состояний термодинамической системы в виде многомерных поверхностей.

В целом при выполнении выпускной квалификационной работы получены следующие результаты:

- использование математических методов позволяют получить соотношения, устанавливающие связи между различными термодинамическими свойствами вещества. Показано, что основными продуктами вычисления термодинамических величин являются VXGP, СТАРС, WaterSteamPro;

- состояния в многомерных пространствах можно рассматривать как точки, процессы как кривые, уравнения состояний как поверхности. Для описания термодинамических процессов могут применяться дифференциальные уравнения частных производных первого порядка относительно нескольких переменных состояния;

- в качестве вычислительной среды применялась программа MATLAB. Для вычисления она использует следующие функции: `diff` – для нахождения производной, `solve` – для решения дифференциальных уравнений. Для реализации построения процессов, которые принадлежат термодинамической поверхности, в MATLAB были использованы функции `mesh`, `plot3`, `ezplot3`;

- на основе результатов работы, сформулированы задачи перспективных исследований. Проведен вычислительный эксперимент по нахождению угла между нормалью и касательной плоскостью в произвольной точке, выбранной на поверхности уравнения термодинамических состояний.

Следовательно, поставленные задачи выпускной квалификационной работы выполнены, цель достигнута.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Аверин, Г.В. Системодинамика. – Донецк: Донбасс, 2014. – 403 с.
2. Аверин, Г.В. О фундаментальных основах системодинамики: опытные факты, методология, приложения // Интеллектуальный анализ информации, ИАИ-2011. – К.: НТУ «КПИ», 2011. – С. 152-169.
3. Аверин Г.В., Родригес А.Э., Звягинцева А.В. Направления развития информационных систем для анализа и прогнозирования глобальных процессов // Материалы 3-го Междунар. конгресса «Глобалистика – 2013». – М.: МГУ, 2013. – С. 362-363.
4. Афанасьева-Эренфест, Т.А. Необратимость, односторонность и второе начало термодинамики // Журн. прикл. физики, т. 5, 1928, вып. 3 – 4. – С. 3-30.
5. Базаров, И.П. Термодинамика. – Изд-е 4-е. – М.: Высшая школа, 1991. – 376 с.
6. Гельфер, М. История и методология термодинамики и статистической физики / Изд. 2-е, перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1981. – 536 с.
7. Гутер, Р.С., Янпольский А.Р. Дифференциальные уравнения. – М.: Физматгиз, 1962. – 247 с.
8. Гухман, А.А. Об основаниях термодинамики. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 383 с.
9. Зоммерфельд, А. Термодинамика и статистическая физика. – М.: Иностранная литература, 1955. – 482 с.
10. Каратеодори, К. К аксиоматике специальной теории относительности. – В кн.: Развитие современной физики: Пер. с нем. – М.: Наука, 1964. – С. 167-187.
11. Каратеодори, К. Об основах термодинамики. – В кн.: Развитие современной физики: Пер. с нем. – М.: Наука, 1964. – С. 188-222.

12. Кирилин В.А., Сычев В.В., Шейндлин А.Е. Техническая термодинамика. – М.: Энергия, 1974. – 448 с.
13. Кошляков, И.С. Уравнения в частных производных математической физики. – М.: Вища школа, 1970. – 712 с.
14. Млодзеевский, А.Б. Геометрическая термодинамика. М.: Из-во МГУ, 1956. – 94 с.
15. Мусхелишвили, Н.И. Курс аналитической геометрии. – М.: Высшая школа, 1967. – 655 с.
16. Путилов, К.А. Термодинамика. – М.: Наука, 1971. – 375 с.
17. Сычев, В.В. Дифференциальные уравнения термодинамики. – М.: Высшая школа, 1991. – 214 с.
18. Сычев, В.В. Сложные термодинамические системы. – М.: Энергоатомиздат, 1986. – 208 с.
19. Техническая термодинамика / под ред. В.И. Крутова, 3-е изд-е, перераб. и доп. – М.: Высшая школа, 1991. – 406 с.
20. Франкфурт, У. К истории аксиоматики термодинамики. – В кн.: Развитие совр. физики: Пер. с нем. – М.: Наука, 1964. – С. 257-292.
21. Шиллер, Н.Н. 1898. О втором законе термодинамики и одной новой его формулировке. – К.: Типография ун-та, 1898. – 12 с.
22. Эльсгольц, Л.Э. Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление. – М.: Наука, 1969. – 424 с.
23. Сайт программы WaterSteamPro [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.wsp.ru/ru/> – программа для расчета свойств воды, водяного пара, газов и смесей газов.
24. Теплота – все для Теплотехника и Теплоэнергетика [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://www.teplota.org.ua/2008-04-29-opredelenie-svoistv-gazov-vxgp-paket-programm.html> – пакет программ VXGP для вычисления свойств газов.
25. Сайт программы СТАРС [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://promo.infars.ru/stars> – программа для расчета свойств веществ.

26. Электронная энциклопедия «Википедия» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: https://ru.wikipedia.org/wiki/Исходные_положения_термодинамики.
27. Сайт база презентаций для учителей и учеников [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://present5.com/termodinamika-i-teploperedacha-vtoroj-zakon-termodinamiki-obratimye-i/> – второй закон термодинамики.
28. Сайт центра компетенций MathWorks [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://matlab.ru/products/matlab> – продукт MATLAB.
29. Электронная библиотека студента [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.bibliofond.ru/view.aspx?id=865475> – основы программирования на MATLAB.
30. Сайт Exponenta.ru [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <http://old.exponenta.ru/soft/MATLAB/potemkin/book2/chapter8/diff.asp> – вычисление конечных разностей и приближенное дифференцирование.
31. Система «Единое окно доступа к образовательным ресурсам» [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://window.edu.ru/catalog/pdf2txt/916/23916/6426?p_page=5 – введение в систему MATLAB.

Приложение А. Построение характеристической поверхности
состояний азота

```
clc;
clear;
a=35;
b=11;
c=55;
u = (-10:10:300)';
v = -1:1:30;
Z = a*u*b*v/297;
X=(-30:30);
Y=(-30:30);
Z1=b/297*(X-35)+ a/297*(Y-11)+55;
hS1=mesh(u,v,Z); %поверхность
hold on
plot3 (X, Y, Z1, 'g'); %касательная
xlabel ('x'); ylabel ('y'); zlabel ('z')
hold on
ezplot3('11/297*t+35', '35/297*t+11', -t+55', [-30,30], 'r'); %нормаль
```

Приложение Б. Построение характеристической поверхности состояний водорода

```
clc;
clear;
a=35;
b=11;
c=3;
u = (-10:10:300)';
v = -1:1:30;
Z = a*u*b*v/4125;
X=(-30:30);
Y=(-30:30);
Z1=b/4125*(X-35)+ a/4125*(Y-11)+3;
hS1=mesh(u,v,Z); %поверхность
hold on
plot3 (X, Y, Z1, 'g'); %касательная
xlabel ('x'); ylabel ('y'); zlabel ('z')
hold on
ezplot3('11/4125*t+35', '35/4125*t+11', -t+3', [-30,30], 'r'); %нормаль
```

Приложение В. Построение характеристической поверхности
состояний воздуха

```
clc;
clear;
a=35;
b=17;
c=50;
u = (-10:10:300)';
v = -1:1:30;
Z = a*u*b*v/287;
X=(-30:30);
Y=(-30:30);
Z1=b/287*(X-35)+ a/287*(Y-17)+50;
hS1=mesh(u,v,Z); %поверхность
hold on
plot3 (X, Y, Z1, 'g'); %касательная
xlabel ('x'); ylabel ('y'); zlabel ('z')
hold on
ezplot3('17/287*t+35', '35/287*t+17', -t+50', [-30,30], 'r'); %нормаль
```