

Нестеров Владимир Николаевич, Сотникова Елена Олеговна

**ПРОЦЕССЫ РЕЛАКСАЦИИ В НИЗКОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ**

Адрес статьи: [www.gramota.net/materials/1/2010/6/10.html](http://www.gramota.net/materials/1/2010/6/10.html)

Статья опубликована в авторской редакции и отражает точку зрения автора(ов) по рассматриваемому вопросу.

Источник

**Альманах современной науки и образования**

Тамбов: Грамота, 2010. № 6 (37). С. 29-34. ISSN 1993-5552.

Адрес журнала: [www.gramota.net/editions/1.html](http://www.gramota.net/editions/1.html)

Содержание данного номера журнала: [www.gramota.net/materials/1/2010/6/](http://www.gramota.net/materials/1/2010/6/)

**© Издательство "Грамота"**

Информация о возможности публикации статей в журнале размещена на Интернет сайте издательства: [www.gramota.net](http://www.gramota.net)

Вопросы, связанные с публикациями научных материалов, редакция просит направлять на адрес: [almanac@gramota.net](mailto:almanac@gramota.net)

УДК 544.431.123

Владимир Николаевич Нестеров, Елена Олеговна Сотникова  
Волгоградский архитектурно-строительный университет

ПРОЦЕССЫ РЕЛАКСАЦИИ В НИЗКОМЕРНЫХ СИСТЕМАХ<sup>©</sup>

Релаксация – процесс становления статистического равновесия в физической системе, состоящей из большого числа частиц. Все процессы релаксации являются неравновесными и необратимыми процессами, при которых в системе происходит диссипация энергии, т.е. производится энтропия, в частности в замкнутой системе энтропия возрастает. В различных системах релаксация имеет свои особенности, поэтому процессы релаксации весьма многообразны. Время  $\tau$  установления частичного или полного равновесия в системе называется временем релаксации. В трехмерных системах, когда отклонение от равновесия невелико, релаксация физической величины, описывающей систему  $y$ , обычно происходит по закону:

$$y = y_0 \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right)$$

где  $y_0$  начальное значение физической величины  $y$ .

В газах процесс установления равновесия определяется длиной свободного пробега  $l$  и временем свободного пробега  $\tau_{пр}$ . Отношение  $\frac{l}{\tau_{пр}}$  равно по порядку величины средней скорости частиц. Величины  $l$  и  $\tau_{пр}$

малы по сравнению с макроскопическими масштабами длины и времени. С другой стороны, для газов время свободного пробега значительно больше времени столкновения частиц  $\tau_c$ . При этом условия релаксация определяется лишь парными столкновениями частиц.

В жидкостях теряют смысл понятия времени и длины свободного пробега частиц. Аналогичную роль для жидкости играют величины  $\tau_1$  и  $l_1$ , время и длина затухания пространственно-временных корреляционных функций динамических переменных, описывающих потоки энергии и импульса.  $\tau_1$  и  $l_1$  характеризуют затухания во времени и пространстве взаимного влияния молекул, т.е. корреляций. В макроскопически малых объемах жидкости, но в достаточно больших по сравнению с длиной корреляции  $l_1$ , локальное равновесное распределение устанавливается за время порядка времени корреляции  $\tau_1$  в результате интенсивного взаимодействия между частицами.

В твердых телах релаксацию можно описывать как релаксацию в газе квазичастиц. В этом случае можно ввести время и длину свободного пробега соответствующих квазичастиц при условии малости возбуждения системы.

При фазовых переходах релаксация может иметь сложный характер, если переход из неравновесного состояния в равновесное является фазовым переходом 1-го рода, то система сначала переходит в метастабильное состояние. Релаксация из метастабильного состояния в стабильное может оказаться настолько медленным процессом, что метастабильное состояние можно рассматривать как равновесное. Такие процессы характерны в стеклообразном состоянии. Вблизи точки фазового перехода 2-го рода параметр порядка, характеризующий степень упорядоченности фаз, стремится к нулю, а его время релаксации сильно увеличивается.

Еще сложнее характер релаксации в системах, далеких от термодинамического равновесия. Так, в открытых системах возможно появление стационарных состояний, обладающих пространственной или временной когерентностью. Это характерно для неравновесных фазовых переходов.

В настоящей работе рассматривается релаксация в низкомерных системах. Под низко мерными системами понимается системы, протяженность которых по одной из пространственных координат много больше протяженности по другим пространственным координатам. Такими системами могут выступать, например, длинные узкие капилляры, длинные нанотрубки. При выведении таких систем из равновесия система достаточно быстро приходит в равновесие по координатам с малой протяженностью и идет, в основном, по координате, вдоль которой система имеет большую протяженность. В этом случае систему можно рассматривать как одномерную. Разделим такую систему вдоль координаты на несколько подсистем. Каждая из этих подсистем может характеризоваться некоторой физической величиной  $n_i(t)$  где  $i$  - порядковый номер подсистемы. В связи с существенной протяженностью вдоль одной координаты,  $i$ -ая подсистема может взаимодействовать только с соседними подсистемами  $(i-1)$  и  $(i+1)$ . Для простоты предположим, что  $n_i$  является концентрацией частиц в  $i$ -ой подсистеме. Тогда изменение концентрации  $dn_i$  за время  $dt$  зависит от значения концентрации в  $i$ -ой подсистеме  $n_i$  и от концентрации в соседних подсистемах  $(i-1)$  и  $(i+1)$ .

$$dn_i(t) = -n_i + \frac{1}{2}(n_{i-1} + n_{i+1})dt \quad (1)$$

Появление коэффициента  $\frac{1}{2}$  перед членами  $n_{i-1}$  и  $n_{i+1}$  обусловлено тем, что обмен частиц происходит не только с  $i$ -ой подсистемой, но и с другими соседними подсистемами ( $(i-1)$  подсистема обменивается частицами с подсистемой  $(i-2)$ ,  $(i+1)$  подсистема обменивается с подсистемой  $(i+2)$ ).

В случае ограниченной системы число подсистем  $Q$  тоже ограничено. Уравнение изменения концентрации частиц для крайних подсистем имеет несколько иной характер, чем (1). Для самых крайних систем ( $(i=1)$  и  $(i=Q)$ ) уравнение имеет вид:

$$dn_1 = (-n_1 + \frac{1}{2}n_2)dt \quad (2)$$

$$dn_Q = (-n_Q + \frac{1}{2}n_{Q-1})dt \quad (3)$$

а соседние с ними подсистемы ( $(i=2)$  и  $(i=Q-1)$ ):

$$dn_2 = (-n_2 + n_1 + \frac{1}{2}n_3)dt \quad (4)$$

$$dn_{Q-1} = (-n_{Q-1} + n_Q + \frac{1}{2}n_{Q-2})dt \quad (5)$$

Производя деление уравнений (1)-(5) на время  $dt$ , получаем систему уравнений, описывающих релаксацию концентрации в низкомерной системе:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}n_1 = -n_1 + \frac{1}{2}n_2 \quad (6) \\ \frac{d}{dt}n_2 = -n_2 + n_1 + \frac{1}{2}n_3 \quad (7) \\ \frac{d}{dt}n_3 = -n_3 + \frac{1}{2}(n_2 + n_4) \quad (8) \\ \frac{d}{dt}n_i = -n_i + \frac{1}{2}(n_{i-1} + n_{i+1}) \quad \text{при } i=3, \dots, Q-3 \quad (9) \\ \frac{d}{dt}n_{Q-1} = -n_{Q-1} + n_Q + \frac{1}{2}n_{Q-2} \quad (10) \\ \frac{d}{dt}n_Q = -n_Q + \frac{1}{2}n_{Q-1} \quad (11) \end{array} \right.$$

Для определенности рассмотрим систему, состоящую из 11 подсистем ( $Q=11$ ). На Рисунке 1 представлена реализация модели в программном пакете MathCAD.

В программе вначале задается промежуток времени релаксации системы ( $T1:=300$ ). Далее идет блок решения обыкновенных дифференциальных уравнений (Given...Odesolve). В этом блоке вначале записываются дифференциальные уравнения, описывающие релаксацию в каждом из 11 узлов. Ниже задаются начальные условия (состояние системы в момент времени ( $t=0$ )). Строка Odesolve выводит результаты решения дифференциальных уравнений, временные зависимости, концентрации ( $n$ ) от времени ( $t$ ) на промежутке времени от 0 до  $T1$ .

```

T1 := 300
Given

$$\frac{d}{dt}n1(t) = -n1(t) + \frac{1}{2}n2(t)$$


$$\frac{d}{dt}n2(t) = -n2(t) + n1(t) + \frac{1}{2}n3(t)$$


$$\frac{d}{dt}n3(t) = -n3(t) + \frac{1}{2}n2(t) + \frac{1}{2}n4(t)$$


$$\frac{d}{dt}n4(t) = -n4(t) + \frac{1}{2}n3(t) + \frac{1}{2}n5(t)$$


$$\frac{d}{dt}n5(t) = -n5(t) + \frac{1}{2}n4(t) + \frac{1}{2}n6(t)$$


$$\frac{d}{dt}n6(t) = -n6(t) + \frac{1}{2}n5(t) + \frac{1}{2}n7(t)$$


$$\frac{d}{dt}n7(t) = -n7(t) + \frac{1}{2}n6(t) + \frac{1}{2}n8(t)$$


$$\frac{d}{dt}n8(t) = -n8(t) + \frac{1}{2}n7(t) + \frac{1}{2}n9(t)$$


$$\frac{d}{dt}n9(t) = -n9(t) + \frac{1}{2}n8(t) + \frac{1}{2}n10(t)$$


$$\frac{d}{dt}n10(t) = -n10(t) + n11(t) + \frac{1}{2}n9(t)$$


$$\frac{d}{dt}n11(t) = -n11(t) + \frac{1}{2}n10(t)$$

n1(0) = 1      n2(0) = 0      n3(0) = 0      n4(0) = 0
n5(0) = 0      n6(0) = 0      n7(0) = 0      n8(0) = 0
n9(0) = 0      n10(0) = 0     n11(0) = 0

( n1 )
( n2 )
( n3 )
( n4 )
( n5 )
( n6 ) := Odesolve ( ( n1 )
( n7 )              ( n2 )
( n8 )              ( n3 )
( n9 )              ( n4 )
( n10 )             ( n5 )
( n11 )             ( n6 ) , t, T1
                   ( n7 )
                   ( n8 )
                   ( n9 )
                   ( n10 )
                   ( n11 )

```

Рис. 1. Реализация в MathCAD модели релаксации в одномерной системе, состоящей из Q=11 подсистем

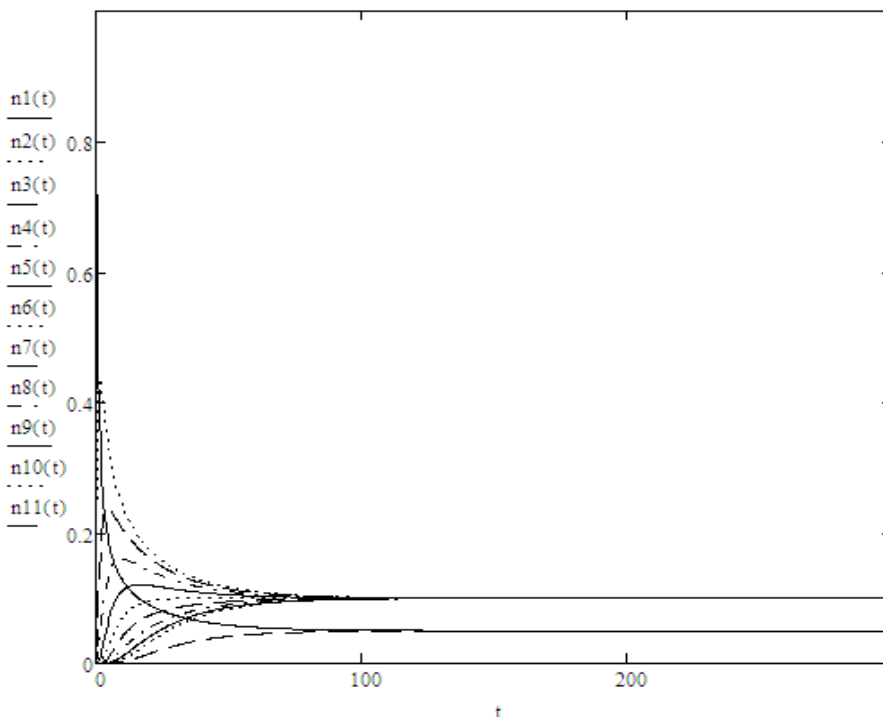
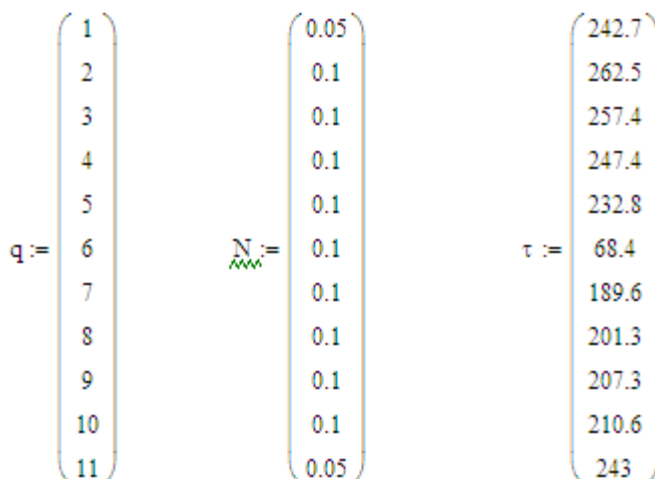


Рис. 2. Графики временных зависимостей концентраций частиц в подсистемах для случая Q=11, n1(0)=1, n2(0)=n3(0)=n4(0)=n5(0)=n6(0)=n7(0)=n8(0)=n9(0)=n(10)=n(11)=0

Далее с помощью панели инструментов Graph вставляется график X-Y Plot. По оси абсцисс задается переменная  $t$ , по оси ординат вводятся последовательно функции изменения концентрации  $n1(t)$ ,  $n2(t)$ , ...  $n11(t)$ .

Пределы изменения времени задаются от 0 до  $T1$ , пределы изменения концентрации в узлах задается от 0 до 1. В результате получается график подобный приведенному на Рисунке 2.

Далее щелчком мыши выделяем полученный график и на панели инструментов Graph выбираем инструмент Trace. Далее щелкаем по графику  $n1(t)$  и с помощью стрелок курсора передвигаем перекрестие инструмента X-Y Trace. Величина X-Value соответствует времени  $t$ , величина Y-Value соответствует в данном случае концентрации в первой подсистеме  $n1$ . Передвигая курсор до времени  $t_1$ , находим равновесное значение  $n1$  ( $n1(T1)=0.05$ ). Далее передвигая курсор влево, находим время, при котором значение  $n1$  отлично от равновесного значения. При этом величина X-Value дает значение времени релаксации подсистемы 1. Аналогично измеряются величины других подсистем. Результаты измерений заносятся в соответствующие векторы матрицы, состоящей из 1 столбца и 11 строк), как показано на Рисунке 3.



**Рис. 3.** Результаты компьютерного моделирования для случая  $Q=11, n1(0)=1, n2(0)=n3(0)=n4(0)=n5(0)=n6(0)=n7(0)=n8(0)=n9(0)=n(10)=n(11)=0$

Аналогичным образом получаем графики и значения величины равновесного значения концентрации и времени релаксации для различных подсистем при различных начальных состояниях:

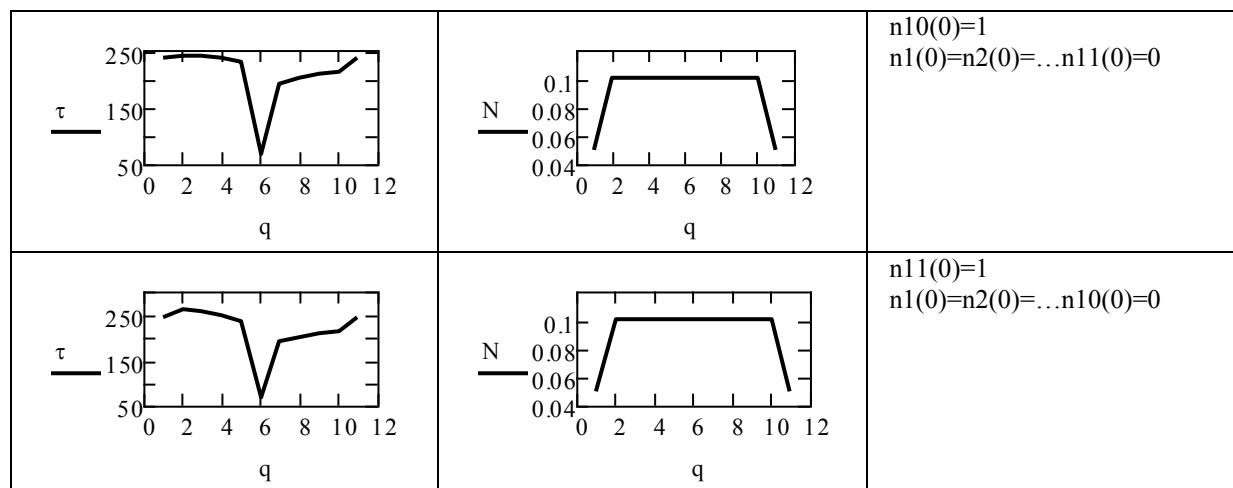
$n1(0)=1, n2(0)=n3(0)=n4(0)=n5(0)=n6(0)=n7(0)=n8(0)=n9(0)=n(10)=n(11)=0$ .

Результаты моделирования представлены в Таблице 1.

**Таблица 1.** Графики равновесной концентрации и времени релаксации при различных начальных условиях

Время релаксации	Равновесная концентрация	Начальные условия
		$n1(0)=1$ $n2(0)=n3(0)=\dots n11(0)=0$
		$n2(0)=1$ $n1(0)=n3(0)=\dots n11(0)=0$

		<p><math>n_3(0)=1</math>  <math>n_1(0)=n_2(0)=\dots n_{11}(0)=0</math></p>
		<p><math>n_4(0)=1</math>  <math>n_1(0)=n_2(0)=\dots n_{11}(0)=0</math></p>
		<p><math>n_5(0)=1</math>  <math>n_1(0)=n_2(0)=\dots n_{11}(0)=0</math></p>
		<p><math>n_6(0)=1</math>  <math>n_1(0)=n_2(0)=\dots n_{11}(0)=0</math></p>
		<p><math>n_7(0)=1</math>  <math>n_1(0)=n_2(0)=\dots n_{11}(0)=0</math></p>
		<p><math>n_8(0)=1</math>  <math>n_1(0)=n_2(0)=\dots n_{11}(0)=0</math></p>
		<p><math>n_9(0)=1</math>  <math>n_1(0)=n_2(0)=\dots n_{11}(0)=0</math></p>



Из анализа полученных данных (Таблица 1) видно, что:

- 1) равновесная концентрация не зависит от начальных условий;
- 2) для различных подсистем время релаксации различно;
- 3) во всех случаях, кроме случая  $n_6(0)=1$ , зависимость времени релаксации от номера подсистемы имеет несимметричный характер;
- 4) в случае  $n_6(0)=1$  зависимость времени релаксации от номера подсистемы имеет симметричный вид и имеет 2 минимума в подсистемах 4 и 8. В подсистемах время релаксации имеет локальный максимум в крайних подсистемах (1, 2, 10, 11 подсистемах);
- 5) в случаях  $n_6(0) \neq 1$  зависимость времени релаксации имеет 1 минимум в средней подсистеме (6 подсистема).

На основании анализа данных можно прийти к выводу, что в одномерной системе времена релаксации существенно зависят, как от положения подсистемы в системе, так и от начальных условий. Равновесные состояния одномерной системы не зависят от начальных условий, для всех подсистем, кроме крайних, равновесное состояние одинаково.

#### Список литературы

1. Базаров И. П. и др. Термодинамика и статистическая физика: теория равновесных систем: учебное пособие для ун-тов по спец. «Физика» / И. П. Базаров, Э. В. Геворкян, П. Н. Николаев. М.: Изд-во МГУ, 1986. 309 с.
2. Волков И. К. Случайные процессы: учеб. для вузов / И. К. Волков, С. М. Зуев, Г. М. Цветкова; под ред. В. С. Зарубина, А. П. Крищенко. М.: Изд-во МГТУ им. Н. Э. Баумана, 2003. 447 с.
3. Грот С. Р. Неравновесная термодинамика / пер. с англ. В. Т. Хозяинова; под ред. Д. Н. Зубарева. М.: Мир, 1964. 456 с.
4. Гурский Д. А. Вычисления в MathCAD: для мат. и естеств.-науч. специальностей, преподавателей и науч. работников. Минск: ООО «Новое знание», 2003. 813 с.
5. Дьярмати Ч. Неравновесная термодинамика / пер. с англ. М.: Мир, 1924. 304 с.
6. Макаров Е. Г. Инженерные расчеты в MathCAD 14. СПб.: Питер, 2007. 591 с.

УДК 534.222.2

Евгений Степанович Прохоров

Новосибирский государственный педагогический университет

#### ПРОСТАЯ МОДЕЛЬ ДЛЯ ОПИСАНИЯ РАСПРОСТРАНЕНИЯ ГАЗОДЕТОНАЦИОННЫХ ВОЛН В СУЖАЮЩИХСЯ КАНАЛАХ<sup>©</sup>

Детонация представляет волновой процесс распространения по горючему (взрывчатому) веществу зоны экзотермической химической реакции со сверхзвуковой скоростью  $D$  ( $D > c_0$ , где  $c_0$  – скорость звука в данном веществе). Выделяющаяся в зоне реакции энергия обеспечивает самоподдерживающееся распространение детонационной волны (ДВ). При выходе детонации на установившийся режим (режим Чепмена – Жуге) скорость фронта ДВ стремится к своему постоянному минимальному значению  $D_{CJ}$ , которое принимается в качестве основной характеристики взрывчатого вещества [1]. Здесь и далее нижний индекс «CJ» используется для обозначения параметров детонации Чепмена–Жуге.