ЖЭТФ, 2020, том 157, вып. 4, стр. 703–706

КЛАССИЧЕСКАЯ АДВЕКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

П. С. Кондратенко [a,b*], *А. Л. Матвеев* [a]

[a] *Институт проблем безопасного развития атомной энергетики Российской академии наук 115191, Москва, Россия*

[b] *Московский физико-технический институт 141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 21 ноября 2019 г.,
после переработки 21 ноября 2019 г.
Принята к публикации 22 ноября 2019 г.

Предложен метод решения задачи о переносе примеси в неоднородной среде, обусловленном классическими процессами диффузии и адвекции. Отдельно проанализирован случай, когда адвекция отсутствует. Здесь акцентировано внимание на расстояниях от источника примеси, значительно больших размера основной области ее локализации, и был применен асимптотический подход, разработанный одним из авторов (П. С. К.). Задача сведена к решению дифференциального уравнения первого порядка, которое определяет возникающую при таком подходе линейную траекторию концентрационного сигнала от источника до точки наблюдения. Результат для концентрации выражен через одномерные интегралы вдоль линии концентрационного сигнала. Решение задачи о переносе в присутствии адвекции получено путем перехода в систему координат, сопутствующую адвекции. Ключевыми элементами, вошедшими в полученное выражение для концентрации, являются эффективное время и смещение примеси — оба вызваны адвекцией.

DOI: 10.31857/S0044451020040136

1. ВВЕДЕНИЕ

Аналитическое решение задачи о классической адвекции-диффузии примеси для однородных сред хорошо известно. Однако реальные среды, как правило, являются неоднородными, и для них решение задачи требует выполнения трудоемких численных расчетов уравнения в частных производных второго порядка. Применительно к неклассическим процессам переноса в неоднородных средах в работе [1] был предложен аналитический подход, позволивший свести задачу к обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка. Он основан на асимптотическом описании, когда расстояние от источника до точки наблюдения велико в сравнении с размерами основной области локализации примеси в заданный момент времени. На таких масштабах формирование концентрации обусловлено коротковолновой частью механизма переноса и зависимость концентрации от расстояния имеет вид убывающей экспоненты с показателем, существенно большим единицы. Возникает ситуация, аналогичная приближению геометрической оптики в электродинамике [2] и квазиклассическому приближению в квантовой механике [3].

Целью настоящей работы является получение аналитических результатов для задачи о переносе примеси в неоднородной среде, где механизмами переноса являются классические процессы адвекции и диффузии. В разд. 2 в рамках асимптотического подхода [1] получены результаты в случае, когда действует диффузия, а адвекция отсутствует. В разд. 3 исследованы процессы переноса в неоднородной среде, которые наряду с диффузией обусловлены также адвекцией. В заключительном разделе кратко подведены итоги.

2. КЛАССИЧЕСКАЯ ДИФФУЗИЯ

Концентрация примеси удовлетворяет известному уравнению

$$\frac{\partial c(\mathbf{r},t)}{\partial t} = \operatorname{div}\left(D\nabla c(\mathbf{r},t)\right), \tag{1}$$

* E-mail: kondrat@ibrae.ac.ru

где коэффициент диффузии является функцией координат, $D = D(\mathbf{r})$. Считаем, что в начальный момент времени вся примесь сосредоточена в начале координат,

$$c(\mathbf{r}, 0) = N\delta(\mathbf{r}), \tag{2}$$

где N — полное число частиц.

В представлении Лапласа,

$$c_p(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dt\, c(\mathbf{r}, t)e^{-pt},$$

уравнение (1) с учетом (2) принимает вид

$$pc_p(\mathbf{r}) - \operatorname{div}\{D(\mathbf{r})\nabla c_p(\mathbf{r})\} = N\delta(\mathbf{r}). \tag{3}$$

Нас будет интересовать концентрация на асимптотически далеких расстояниях от источника примеси, когда $r \gg R(t)$, где $R(t)$ — размер основной области ее локализации в момент времени t. Тогда решение уравнения (3) удобно представить в форме [1]

$$c_p(\mathbf{r}) = A_p(\mathbf{r}) \exp[-\Gamma_p(\mathbf{r})], \quad \Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1. \tag{4}$$

Подставляя решение (4) в уравнение (1), в главном порядке по малому параметру Γ_p^{-1} приходим к уравнению в частных производных первого порядка:

$$p - D(\mathbf{r}) \left(\nabla\Gamma_p(\mathbf{r})\right)^2 = 0. \tag{5}$$

Отсюда следует, что

$$\begin{gathered} \nabla\Gamma_p(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{p}{D_0}}\, n(\mathbf{r})\boldsymbol{\nu}(\mathbf{r}), \quad D_0 = D(0), \\ n(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{D_0}{D(\mathbf{r})}}\,, \quad |\boldsymbol{\nu}(\mathbf{r})|^2 = 1. \end{gathered} \tag{6}$$

Отметим, что фактическим параметром разложения, в результате которого мы пришли к уравнению (5), является комбинация $(L|\nabla\Gamma_p|)^{-1}$, где L — характерный масштаб длины, на котором заметно меняется коэффициент диффузии.

Уравнение (5) по своей форме аналогично уравнению эйконала в геометрической оптике [2] (или уравнению Гамильтона–Якоби в классической механике [4]). Соответственно, роль эйконала в задаче о диффузии в неоднородной среде играет функция $\Gamma_p(\mathbf{r})$, а величина $n(\mathbf{r})$ в выражениях (6) является аналогом коэффициента преломления. Решение уравнения (5) для функции $\Gamma_p(\mathbf{r})$ сводится к линейному интегралу

$$\Gamma_p(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{p}{D_0}}\, \psi(\mathbf{r}), \quad \psi(\mathbf{r}) = \int_0^r dl\, n(\mathbf{r}) \tag{7}$$

вдоль линии от источника до точки наблюдения. При этом линия определяется из условия минимума интеграла (7)

$$\delta_l \psi(\mathbf{r}) \equiv \delta_l \int_0^r dl\, n(\mathbf{r}) = 0. \tag{8}$$

Величина dl в выражениях (7) и (8) является дифференциальным элементом указанной линии, а единичный вектор $\boldsymbol{\nu}(\mathbf{r})$ из (6) направлен по касательной к ней. Эта линия является аналогом траектории луча в геометрической оптике, а в нашей задаче (о переносе примеси) ее можно назвать траекторией концентрационного сигнала. Условие (8) является аналогом принципа Ферма в геометрической оптике [2] или принципа Мопертюи в классической механике [4].

Подобно геометрической оптике [2], из соотношения (8) вытекает обыкновенное дифференциальное уравнение для траектории:

$$\frac{d\boldsymbol{\nu}}{dl} = \frac{1}{n}\left(\nabla n - \boldsymbol{\nu}(\boldsymbol{\nu}\cdot\nabla n)\right). \tag{9}$$

Из условия (8) и уравнения (9) видно, что в однородной среде, когда $n(\mathbf{r}) = 1$, траектория концентрационного сигнала является отрезком прямой линии, соединяющей точку наблюдения с источником. В том случае, когда между источником и точкой наблюдения имеется поверхность, где коэффициент преломления терпит скачок, траектория концентрационного сигнала в точке пересечения указанной поверхности испытывает излом по закону Снеллиуса:

$$\frac{\sin\theta_1}{\sqrt{D_1}} = \frac{\sin\theta_2}{\sqrt{D_2}}. \tag{10}$$

Здесь D_1, D_2 — коэффициенты диффузии по разные ее стороны границы, θ_1, θ_2 — углы между линией концентрационного сигнала и нормалью к поверхности границы по соответствующим ее сторонам.

Перейдем к вычислению предэкспоненты $A_p(\mathbf{r})$ в выражении (4). Для этого подставим (4) в (3), отобрав слагаемые, которые по сравнению с уравнением (5) имеют следующий порядок малости по фактору $(L|\nabla\Gamma_p|)^{-1}$. В результате приходим к уравнению

$$\begin{gathered} 2D(\mathbf{r})\nabla\Gamma_p\nabla A_p(\mathbf{r}) + A_p(\mathbf{r})\nabla\Gamma_p\nabla D(\mathbf{r}) + \\ + D(\mathbf{r})A_p(\mathbf{r})\Delta\Gamma_p = 0. \end{gathered} \tag{11}$$

После подстановки (6) в (11) имеем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка:

$$\frac{d}{dl}[\ln(A_p^2(\mathbf{r})D(\mathbf{r})n(\mathbf{r})] + \operatorname{div}\boldsymbol{\nu}(\mathbf{r}) = 0. \tag{12}$$

Здесь d/dl — производная вдоль линии концентрационного сигнала. Решением уравнения (12) является

$$A_p(\mathbf{r}) = \frac{B\sqrt{n(\mathbf{r})}}{l(\mathbf{r})}\exp\left[-\int\limits_0^{\mathbf{r}} dl\left(\frac{\operatorname{div}\boldsymbol{\nu}}{2} - \frac{1}{l}\right)\right]. \tag{13}$$

В этом выражении $l(\mathbf{r})$ — длина линии концентрационного сигнала от источника до точки наблюдения, B — константа интегрирования. На малых расстояниях от источника, $r \ll L$, когда среду можно считать однородной и $D(\mathbf{r}) = D_0$, $n = 1$, с помощью уравнения (3) с учетом соотношения (4) находим

$$A_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{4\pi D_0 r}, \quad r \ll L. \tag{14}$$

Сравнивая соотношения (13) и (14), получаем выражение $B = N(4\pi D_0)^{-1}$, подстановка которого в (13) дает

$$A_p(\mathbf{r}) = \frac{N\sqrt{n(\mathbf{r})}}{4\pi D_0 l(\mathbf{r})}\exp\left[-\int\limits_0^{\mathbf{r}} dl\left(\frac{\operatorname{div}\boldsymbol{\nu}}{2} - \frac{1}{l}\right)\right]. \tag{15}$$

Подставляя (15) и (7) в (4) и выполняя обратное преобразование Лапласа, приходим к следующему выражению для концентрации в координатно-временном представлении:

$$c(\mathbf{r},t) = \frac{N}{(4\pi D_0 t)^{3/2}}\sqrt{n(\mathbf{r})}\,\frac{\psi(\mathbf{r})}{l(\mathbf{r})} \times \\ \times \exp\left\{-\frac{\psi^2(\mathbf{r})}{4D_0 t} - \int\limits_0^{\mathbf{r}} dl\left(\frac{\operatorname{div}\boldsymbol{\nu}(\mathbf{r})}{2} - \frac{1}{l}\right)\right\}. \tag{16}$$

3. КЛАССИЧЕСКАЯ АДВЕКЦИЯ-ДИФФУЗИЯ

После добавления в уравнение (1) слагаемого, ответственного за адвекцию, уравнение переноса приобретает вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \operatorname{div}(\mathbf{u}c - D\nabla c) = 0, \tag{17}$$

где скорость адвекции, как и коэффициент диффузии, являются функциями координат: $\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r})$, $D = D(\mathbf{r})$. На относительно малых временах, когда $t \ll 4D/u^2$, адвективным слагаемым в уравнении (17) можно пренебречь, и тогда задача сводится к уже рассмотренной в предыдущем разделе. На больших временах, $t \gg 4D/u^2$, в уравнении (17) удобно перейти в сопутствующую относительно адвекции систему координат $\mathbf{r} \to \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{r}_u(t)$, где вектор $\mathbf{r}_u(t)$ удовлетворяет уравнению

$$\frac{d}{dt}\,\mathbf{r}_u(t) = \mathbf{u}(\mathbf{r}_u(t)), \quad \mathbf{r}_u(0) = 0. \tag{18}$$

Тогда, предполагая, что скорость $\mathbf{u}$ удовлетворяет уравнению несжимаемости $\operatorname{div}(\mathbf{u}(\mathbf{r})) = 0$, и считая выполненным неравенство $|\mathbf{r}'| \ll |\mathbf{r}_u(t)|$, из уравнения (18) приходим к уравнению для концентрации $c(\mathbf{r}', t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\,c(\mathbf{r}',t) - D(\mathbf{r}_u(t))\Delta_{r'}c(\mathbf{r}',t) = 0. \tag{19}$$

Его решение имеет вид

$$c(\mathbf{r},t) = N(4\pi D_0\tilde{t})^{-3/2}\exp\left[-\frac{(\mathbf{r}-\mathbf{r}_u(t))^2}{4D_0\tilde{t}(t)}\right], \tag{20}$$

где эффективное время $\tilde{t} \equiv \tilde{t}(t)$ определено выражением

$$\tilde{t} \equiv \tilde{t}(t) = \int\limits_0^t dt'\,\frac{D(\mathbf{r}_u(t'))}{D_0} \tag{21}$$

и $D_0 = D(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}=0}$.

Решение (21) справедливо при выполнении условий $Dt \ll \mathbf{r}_u^2, L^2$, где L — характерный масштаб неоднородности в пространственном распределении скорости адвекции и коэффициента диффузии.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Получены новые аналитические результаты в задаче о классической адвекции-диффузии примеси в неоднородных средах. При чистой диффузии, когда адвекция отсутствует, путем применения асимптотического подхода [1] на расстояниях, значительно превосходящих размер основной области локализации примеси, задача сведена к уравнению в частных производных первого порядка. Это позволило на основе действующего в таких случаях канонического формализма (формализм Гамильтона – Якоби в классической механике) концентрацию примеси, испытывающей диффузию в неоднородной среде, представить в квадратурах — через интегралы вдоль линии, условно названной траекторией концентрационного сигнала. Эта последняя определяется из вариационного принципа, который является аналогом принципа Ферма в геометрической оптике или принципа Мопертюи в классической механике.

Поиск решения общей классической задачи о переносе примеси, когда наряду с диффузией действует и адвекция, происходил на основе перехода в сопутствующую систему координат, в которой адвекция в уравнении переноса формально исчезает, но зато коэффициент диффузии помимо координат (за счет неоднородности среды) приобретает зависимость также и от времени. Решение уравнения удается найти при выполнении некоторых ограничительных условий. В качестве основополагающих элементов найденное выражение для концентрации содержит эффективное время и смещение примеси за счет адвекции. Подобно задаче о чистой диффузии, ключевая роль здесь принадлежит характеристической линии, которая теперь является адвекционной траекторией. Она определяется из системы трех обыкновенных уравнений первого порядка.

Благодарности. Авторы выражают глубокую благодарность Л. В. Матвееву за полезное обсуждение.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант № 18-19-00533).

ЛИТЕРАТУРА

1. П. С. Кондратенко, Письма в ЖЭТФ **106**, 581 (2017).
2. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2005).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория*, Физматлит, Москва (2004).
4. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Физматлит, Москва (2001).