

НЕКЛАССИЧЕСКИЙ ПЕРЕНОС ПРИМЕСИ В МОДЕЛИ ДЫХНЕ С ПАРАМЕТРАМИ, ЗАВИСЯЩИМИ ОТ КООРДИНАТ. ПРИНЦИП ФЕРМА

П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев*

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

Поступила в редакцию 2 ноября 2020 г.,
после переработки 2 ноября 2020 г.
Принята к публикации 4 ноября 2020 г.

Разработана асимптотическая теория переноса примеси в простейшей регулярно-неоднородной среде — модели Дыхне, демонстрирующей субдиффузионный транспортный режим, с параметрами, испытывающими крупномасштабные пространственные зависимости. Результаты для концентрации на расстояниях от источника примеси, значительно превышающих размер основной области ее локализации, выражаются через линейные интегралы вдоль траекторий концентрационных сигналов. Эти траектории получаются из вариационного принципа, который является аналогом принципа Ферма в геометрической оптике. Интегралы вдоль траекторий представляют собой аналоги длины оптического пути. Вид интегралов зависит от режима переноса, а траектории в зависимости от режима могут быть как плоскими, так и трехмерными кривыми.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 90-летию И. Е. Дзялошинского

DOI: 10.31857/S0044451021040155

1. ВВЕДЕНИЕ

Уже многие десятилетия неклассические режимы переноса примеси являются предметом интенсивных исследований (см., например, обзор [1]). Неклассическими (аномальными) принято называть режимы, в которых зависимость размера основной области локализации примеси от времени на больших временах описывается соотношением $R(t) \sim t^\gamma$, где, в отличие от классической диффузии, показатель степени $\gamma \neq 1/2$. Различают супердиффузионные (быстрые), $\gamma > 1/2$, и субдиффузионные (медленные), $\gamma < 1/2$, неклассические режимы переноса. Аномальные процессы встречаются в самых разнообразных средах — от полупроводников до геологических структур. Физическими предпосылками таких процессов могут быть дальнодействующие корреляции или (и) долговременные релаксации характеристик среды, формирующих процессы переноса. В тех случаях, когда размер $R(t)$ оказывается мень-

ше длины корреляции l или (и) текущее время t меньше времени релаксации τ , режим переноса в определенном смысле является неравновесным и может стать неклассическим. При этом в сравнении с классической диффузией свойство $R(t) < l$ служит ускоряющим фактором, а $t < \tau$ — замедляющим.

Обычно при аналитическом описании неклассических процессов среда на больших пространственных масштабах предполагается в среднем однородной. Между тем, реальные среды обладают крупномасштабными неоднородностями. В такой ситуации даже классические процессы адvection-diffusion требуют выполнения довольно трудоемких численных расчетов. Дополнительные, причем принципиальные трудности возникают в случае неклассических процессов, для которых управляющие уравнения для концентрации являются интегродифференциальными, а входящие туда ядра во всех деталях остаются неизвестными.

С целью преодоления указанных трудностей в работе [2] предложен новый подход, базирующийся на асимптотическом описании процессов переноса. Подразумевается важная для практики ситуация,

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

когда расстояние от источника примеси до точки наблюдения велико в сравнении с размерами основной области локализации примеси в заданный момент времени. Как показывает анализ, на таких расстояниях, с одной стороны, формирование концентрации обусловлено коротковолновой частью механизма переноса. С другой, зависимость концентрации от расстояния до источника носит экспоненциальный характер. Формально, таким образом, ситуация напоминает ту, которая имеет место в волновой оптике или квантовой механике, когда становится применимым соответственно приближение геометрической оптики или квазиклассическое приближение. В итоге, концентрация примеси в асимптотической области координат и времени состоит из экспоненты с вещественным показателем — эйконалом, убывающим на далеких расстояниях от источника примеси, и предэкспоненциального множителя. Эйконал удовлетворяет уравнению в частных производных первого порядка, решение его получается на основе вариационного принципа, который является аналогом принципа Ферма. Вывод результатов в [2] проведен на примере модели случайной адvection, приводящей к неклассическому — супердиффузионному режиму переноса [3]. В работах [4, 5] асимптотический подход был применен к анализу переноса примеси на основе классической диффузии (изотропной и анизотропной) в неоднородной среде.

В настоящей работе асимптотический подход приложен к простейшей модели, демонстрирующей субдиффузионный режим переноса и смену режимов во времени, — модели Дыхне [6, 7] с переменными в пространстве параметрами.

Дальнейшая структура статьи следующая. В разд. 2 описана постановка задачи. Раздел 3 посвящен выводу соотношений для эйконала — показателя экспоненты в выражении для концентрации в различных предельных интервалах. В разд. 4 установлены соотношения для предэкспоненциальных множителей и получены асимптотические выражения для концентрации. В заключительном разделе кратко подведены итоги.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Первоначально модель Дыхне [6, 7] была сформулирована следующим образом. Диффузионный перенос примеси происходит в пространстве, состоящем из области I (трещины) — плоскопараллельного слоя толщиной a , заполненного средой с коэффициентом диффузии D , и области II (матрицы) —

остальной части бесконечного пространства, заполненной средой с коэффициентом диффузии d , причем $d \ll D$. В начальный момент времени примесь сосредоточена в одной точке внутри трещины, и начальная концентрация при $t = 0$ задана равенством

$$c(\mathbf{r}, t = 0) = N\delta(\mathbf{r}). \quad (1)$$

Здесь N — полное число частиц примеси, $\mathbf{r} = (\rho, z)$ — радиус-вектор, в котором ось z направлена по нормали к трещине, $\rho = (x, y)$ — двумерная координата вдоль границы плоскопараллельного слоя. Начало координат выбрано так, что границы между областями I и II соответствуют $z = \pm a/2$. Параметры модели a, D, d являются константами. Модель Дыхне является простейшей физической моделью, демонстрирующей неклассическое поведение переноса примеси и смену транспортных режимов во времени: в интервале времени $t \ll t_1$ — быстрая классическая диффузия, $t_1 \ll t \ll t_2$ — субдиффузия, $t \gg t_2$ — медленная классическая диффузия, где $t_1 = a^2/4d$, $t_2 = (D/d)^2 t_1$.

В настоящей работе параметры D, d будут предполагаться функциями координат, удовлетворяющими прежнему условию $d \ll D$, так что уравнение переноса примеси имеет вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \operatorname{div}(\mathfrak{D}\nabla c), \quad (2)$$

$$\mathfrak{D}(\mathbf{r}) = D(\mathbf{r})\theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right) + d(\mathbf{r})\theta\left(|z| - \frac{a}{2}\right)$$

с обычными граничными условиями, требующими непрерывности концентрации $c(\mathbf{r}, t)$ и нормальной составляющей потока примеси $-\mathfrak{D}(\mathbf{r})\nabla c(\mathbf{r}, t)$ при $|z| = a/2$.

Будем считать, что характерные масштабы координатной зависимости функций $D(\mathbf{r})$ и $d(\mathbf{r})$ соответственно $L_f \sim |\nabla \ln D(\mathbf{r})|^{-1}$ и $L_m \sim |\nabla \ln d(\mathbf{r})|^{-1}$ удовлетворяют условиям

$$L_f \gg a, \quad L_m \gtrsim \frac{D}{d}a. \quad (3)$$

Поэтому в дальнейшем, пренебрегая зависимостью коэффициента диффузии внутри трещины (при $|z| < a/2$) от координаты z , будем обозначать его $D(\rho)$.

На малых временах, когда $t \ll t_0$, где $t_0 = a^2/16D_0$, $D_0 = D(0)$, матрица не влияет на перенос внутри трещины и он идет в режиме трехмерной классической диффузии с постоянным коэффициентом диффузии D_0 . На временах $t \gg t_0$ распределение примеси при $|z| < a/2$ по толщине

является практически однородным. Поэтому с учетом граничных условий и начального условия (1), после интегрирования уравнения диффузии (2) по толщине трещины и перехода в представление Лапласа приходим к уравнению

$$\begin{aligned} pc_p(\rho) - \operatorname{div}(D(\rho)\nabla c_p(\rho)) - \\ - \frac{1}{a}d(\rho) \frac{\partial c_p(\rho, z)}{\partial z} \Big|_{z=-a/2-0}^{z=a/2+0} = \\ = \frac{1}{a}N\delta(\rho), \quad |z| \leq \frac{a}{2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь p — переменная Лапласа,

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

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 (4) удобно представить в форме [1]

$$c_p(\rho) = A_p(\rho) \exp[-\Gamma_p(\rho)], \quad \Gamma_p(\rho) \gg 1. \quad (5)$$

Для того чтобы раскрыть третье слагаемое в левой части уравнения (4), требуется рассмотреть уравнение диффузии в матрице. С учетом граничных условий и при выполнении неравенства

$$|\nabla \Gamma_p(\rho)| \ll \sqrt{\frac{p}{d}} \quad (6)$$

уравнение диффузии в матрице согласно (2) принимает вид

$$pc_p(\mathbf{r}) = d_0 \frac{\partial^2 c_p(\mathbf{r})}{\partial t^2}, \quad |z| > \frac{a}{2}. \quad (7)$$

Здесь обозначено

$$d_0 = d(\mathbf{r}) \Big|_{\rho=0, z=a/2}. \quad (8)$$

В уравнении (7) и далее для простоты считаем, что $d(\mathbf{r})|_{z=a/2} = d(\mathbf{r})|_{z=-a/2}$.

С учетом граничного условия для концентрации указанное уравнение имеет очевидное решение:

$$pc_p(\mathbf{r}) = c_p(\rho) \exp \left[- \left(|z| - \frac{a}{2} \right) \sqrt{\frac{p}{d_0}} \right]. \quad (9)$$

Подстановка его в (4) приводит к замкнутому уравнению для концентрации в трещине:

$$\begin{aligned} \left(p + \sqrt{\frac{p}{t_1}} \right) c_p(\rho) - \operatorname{div}(D(\rho)\nabla c_p(\rho)) = \\ = \frac{1}{a}N\delta(\rho). \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь обозначено

$$t_1 = \frac{a^2}{4d_0}. \quad (11)$$

При выполнении неравенства (6) матрица по отношению к примеси в трещине играет роль ловушки. Это приводит к замедлению режима переноса в трещине, в то же время не отменяя участие ее в формировании режима переноса. Иная ситуация возникает при выполнении противоположного неравенства:

$$|\nabla \Gamma_p(\rho)| \gg \sqrt{\frac{p}{d}}. \quad (12)$$

В этом случае матрица полностью берет на себя формирование режима переноса. Для его описания предназначено вытекающее из (2) уравнение

$$pc_p(\mathbf{r}) = \operatorname{div}(d(\mathbf{r})\nabla c_p(\mathbf{r})), \quad |z| \geq a/2. \quad (13)$$

Его решение в асимптотической области имеет вид, аналогичный (5):

$$c_p(\mathbf{r}) = A_p(\mathbf{r}) \exp[-\Gamma_p(\mathbf{r})], \quad \Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1. \quad (14)$$

3. ЭЙКОНАЛ

Благодаря неравенствам $\Gamma_p(\rho) \gg 1$ и $\Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1$ возникают малые параметры

$$\begin{aligned} \min[(r, L_f)|\nabla \Gamma_p|]^{-1} \ll 1, \\ \min[(r, L_m)|\nabla \Gamma_p|]^{-1} \ll 1. \end{aligned} \quad (15)$$

В главном приближении по ним после подстановки выражений (5) и (14) соответственно в уравнения (10) и (13) приходим к уравнениям

$$(\nabla \Gamma_{1p}(\rho))^2 = \frac{p}{D(\rho)}, \quad p \gg \frac{1}{t_1}, \quad (16)$$

$$(\nabla \Gamma_{2p}(\rho))^2 = \frac{\sqrt{p/t_1}}{D(\rho)}, \quad \frac{1}{t_2} \ll p \ll \frac{1}{t_1}, \quad (17)$$

$$(\nabla \Gamma_{3p}(\mathbf{r}))^2 = \frac{p}{d(\mathbf{r})}, \quad p \ll \frac{1}{t_2}, \quad (18)$$

где характерное время $t_2 = (D/d)^2 t_1$ получается из сравнения $|\nabla \Gamma_p(\rho)| \sim \sqrt{p/d}$. Отметим, что именно благодаря второму неравенству из (3) с учетом только что приведенного выражения для характерного времени t_2 , оказалось возможным при $p \gg t_2^{-1}$ воспользоваться приближенным равенством $d(\mathbf{r}) \simeq d_0$.

Далее для удобства перейдем от функций Γ_{sp} к их безразмерным аналогам ψ_s :

$$\begin{aligned}\Gamma_{sp}(\rho) &= \kappa_s(p)\psi_s(\rho), \quad s = 1, 2, \\ \Gamma_{3p}(\mathbf{r}) &= \kappa_3(p)\psi_3(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (19)$$

где размерные множители $\kappa_s(p)$ определены равенствами

$$\begin{aligned}\kappa_1(p) &= \sqrt{\frac{p}{D_0}}, \quad \kappa_2(p) = \left[\frac{p}{D_0^2 t_1}\right]^{1/4}, \\ \kappa_3(p) &= \sqrt{\frac{p}{d_0}}.\end{aligned}\quad (20)$$

На основе (16)–(18) с учетом (19), (20) приходим к уравнениям для безразмерных функций ψ_s :

$$\begin{aligned}(\nabla\psi_{sp})(\rho)^2 &= (n_s(\rho))^2, \quad s = 1, 2, \\ (\nabla\psi_{3p})(\mathbf{r})^2 &= (n_3(\mathbf{r}))^2,\end{aligned}\quad (21)$$

в которых величины n_s определены равенствами

$$\begin{aligned}n_1(\rho) &= \sqrt{\frac{D_0}{D(\rho)}}, \quad n_2(\rho) = n_1(\rho), \\ n_3(\mathbf{r}) &= \sqrt{\frac{d_0}{d(\mathbf{r})}}.\end{aligned}\quad (22)$$

Уравнения (21) являются уравнениями в частных производных первого порядка и по своей форме совпадают с уравнением эйконала в геометрической оптике (ГО) [8]. Поэтому в соответствии с теорией таких уравнений решения записываются в форме

$$\begin{aligned}\psi_1(\rho) &= \int_0^\rho n_1(\rho) dl_1, \quad \psi_2(\rho) = \psi_1(\rho), \\ \psi_3(\mathbf{r}) &= \int_0^{\mathbf{r}} n_3(\mathbf{r}) dl_3.\end{aligned}\quad (23)$$

Здесь интегрирование происходит вдоль траекторий концентрационных сигналов, являющихся аналогом лучей в ГО. Сами траектории определяются из вариационного принципа:

$$\delta \int_0^\rho n_1(\rho) dl_1 = 0, \quad \delta \int_0^{\mathbf{r}} n_3(\mathbf{r}) dl_3 = 0,\quad (24)$$

который является аналогом принципа Ферма в ГО. Из (24) вытекают уравнения для единичных векторов, касательных к траекториям

$$\begin{aligned}\frac{d\nu_1(\rho)}{dl} &= \frac{1}{n_1(\rho)} \left(\nabla n_1(\rho) - \nu_1 \frac{dn_1(\rho)}{dl} \right), \\ \nu_2(\rho) &\equiv \nu_1(\rho),\end{aligned}\quad (25)$$

$$\begin{aligned}\frac{d\nu_3(\mathbf{r})}{dl} &= \frac{1}{n_3(\mathbf{r})} \left(\nabla n_3(\mathbf{r}) - \nu_3 \frac{dn_3(\mathbf{r})}{dl} \right), \\ \nu_3 &\equiv \nu_3(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (26)$$

Траектории при $s = 1, 2$ являются плоскими, а траектория с $s = 3$ — пространственной. Функции n_s могут быть названы индексами концентрационной рефракции, а $\psi_1(\rho)$ и $\psi_3(\mathbf{r})$ — длинами концентрационных путей.

4. КОНЦЕНТРАЦИЯ ПРИМЕСИ В АСИМПТОТИЧЕСКОМ ПРЕДЕЛЕ

В следующем приближении по малому параметру $[\min(r, L)|\nabla\Gamma_p|]^{-1} \ll 1$ из уравнений (10) и (13) после подстановки в них выражений (5) и (14), соответственно, получаются уравнения для предэкспонент:

$$\frac{d \ln A_{sp}(\rho)}{d\psi_s} + \frac{1}{2} \operatorname{div} \left(\frac{\nu_s}{n_s} \right) = 0, \quad d\psi_s = n_s dl_s, \quad s = 1, 2, \quad (27)$$

$$\frac{d \ln A_{3p}(\mathbf{r})}{d\psi_3} + \frac{1}{2} \operatorname{div} \left(\frac{\nu_3}{n_3} \right) = 0, \quad d\psi_3 = n_3 dl_3. \quad (28)$$

Напомним, что величины, отмеченные значком $s = 1, 2$, зависят от двумерной координаты ρ , а со значком $s = 3$ являются функциями трехмерной координаты \mathbf{r} . Решения уравнений (27), (28), удовлетворяющих условию спшивки с точными решениями для однородной среды

$$\begin{aligned}c_{sp}^{(0)}(\rho) &= \frac{N}{a\sqrt{8\pi\kappa_s\rho}} \exp(-\kappa_s\rho), \quad s = 1, 2, \\ c_{3p}^{(0)}(\mathbf{r}) &= \frac{N}{4\pi d_0 r} \exp(-\kappa_3 r),\end{aligned}\quad (29)$$

имеют вид

$$\begin{aligned}c_{sp}(\rho) &= \frac{N}{a D_0 \sqrt{8\pi\kappa_s(p)\psi_s(\rho)}} \times \\ &\times \exp(-\kappa_s\psi_s(\rho) - H_s(\rho)), \quad s = 1, 2, \\ H_1(\rho) &= \frac{1}{2} \int_0^\rho \left(\operatorname{div} \left(\frac{\nu_s}{n_s} \right) - \frac{1}{\psi_s(\rho)} \right) d\psi_s(\rho),\end{aligned}\quad (30)$$

$$H_2(\rho) = H_1(\rho),$$

$$c_{3p}(\mathbf{r}) = \frac{N}{4\pi\psi_3(r)} \exp(-\kappa_3(p)\psi_3(\mathbf{r}) - H_3(\mathbf{r})),$$

$$H_3(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \int_0^{\mathbf{r}} d\psi_3 \left(\operatorname{div} \left(\frac{\nu_3}{n_3} \right) - \frac{2}{\psi_3} \right). \quad (31)$$

Концентрации в пространственно-временном представлении $c(\rho, t)$ и $c(\mathbf{r}, t)$ получаются путем применения операции обратного преобразования Лапласа к выражениям (30), (31):

$$c(t) = \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} A_p \exp\left[pt - \Gamma_p\right] \frac{dp}{2\pi i}, \quad \operatorname{Re} b > 0. \quad (32)$$

Благодаря условию $\Gamma_p \gg 1$, интеграл здесь берется методом стационарной фазы:

$$c(t) = \frac{A_{p_0}}{\sqrt{2\pi \left| \frac{\partial^2 \Gamma}{\partial p^2} \right|_{p=p_0}}} \exp[-\Gamma(t)], \quad (33)$$

$$\Gamma(t) = \Gamma_{p_0} - p_0 t, \quad \frac{\partial \Gamma}{\partial p} \Big|_{p=p_0} - t = 0.$$

В результате сопоставления (30), (31) с (32), (33) с учетом выражений (20) приходим к выражениям

$$c(\rho, t) = \frac{N}{4\pi a D_0 t} \exp[-\Gamma_1(\rho) - H_1(\rho)], \quad (34)$$

$$\Gamma_1(\rho) = \frac{\psi_1^2(\rho)}{4D_0 t}$$

при условии $\Gamma_1(\rho) \gg \max[t/t_1, 1]$;

$$c(\rho, t) = \frac{N}{4\pi a D_0 t \sqrt{3}} \exp[-\Gamma_2(\rho) - H_2(\rho)], \quad (35)$$

$$\Gamma_2(\rho) = \frac{3}{4} \left(\frac{\psi_1^4(\rho)}{4D_0^2 t_1 t} \right)^{1/3},$$

при условии $\max[t/t_2, 1] \ll \Gamma_2(\rho) \ll 3t/t_1$;

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{(4\pi d_0 t)^{3/2}} \exp[-\Gamma_3(\mathbf{r}) - H_3(\mathbf{r})], \quad (36)$$

$$\Gamma_3(\mathbf{r}) = \frac{\psi_3^2(\mathbf{r})}{4d_0 t}$$

при условии $1 \ll \Gamma_3(\mathbf{r}) \ll t/t_2$.

Отмеченные условия применимости выражений (34)–(36) определяются тем, какому из интервалов (16)–(18) принадлежит стационарное значение p_0 переменной Лапласа в (33). Асимптотические выражения (34), (35) и (36) порождены, соответственно, режимами быстрой классической двумерной диффузии, двумерной субдиффузии и медленной классической трехмерной диффузии. Как видно из условий их применимости, они описывают первые по удаленности от источника примеси ступени асимптотик во временных интервалах соответственно $t \ll t_1$,

$t_1 \ll t \ll t_2$ и $t \gg t_2$. Вместе с тем (34) и (35) являются вторыми ступенями соответственно в интервалах $t_1 \ll t \ll t_2$ и $t \gg t_2$, а выражение (34) описывает также третью (наиболее удаленную) ступень асимптотики на самых поздних временах $t \gg t_2$.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Сформулируем основные результаты. На основе асимптотического подхода получены выражения для концентрации примеси в модели Дыхне с переменными в пространстве параметрами — простейшей физической модели, демонстрирующей неклассическое (субдиффузационное) поведение переноса и смену транспортных режимов во времени.

Экспоненциальное убывание концентрационных асимптотик позволило получить для показателей экспонент дифференциальные уравнения в частных производных первого порядка. Поэтому в предельных временных интервалах асимптотические выражения сведены к однократным интегралам вдоль траекторий концентрационных сигналов, которые определяются из вариационного принципа — аналога принципа Ферма в геометрической оптике. Интегралы вдоль траекторий являются аналогами длины оптического пути, а соответствующие им подынтегральные выражения — аналогами индекса рефракции. Основное отличие в результатах модели с пространственно-зависимыми параметрами от модели Дыхне с постоянными параметрами сводится к замене расстояний от источника примеси до точки наблюдения соответствующими им длинами концентрационного пути — интегралами вдоль траектории концентрационных сигналов от индексов рефракции.

Благодарности. В заключение авторы выражают глубокую благодарность Л. В. Матвееву за полезное обсуждение результатов.

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

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, УФН **189**, 691 (2019).
2. П. С. Кондратенко, Письма в ЖЭТФ **106**, 581 (2017).

3. A. M. Dykhne, I. L. Dranikov, P. S. Kondratenko, and L. V. Matveev, Phys. Rev. E **72**, 061104 (2005).
4. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, ЖЭТФ **157**, 703 (2020).
5. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, Ю. Н. Обухов, ЖЭТФ **159**, 719 (2021).
6. А. М. Дыхне, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, Письма в ЖЭТФ **80**, 464 (2004).
7. П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, ЖЭТФ **80**, 494 (2007).
8. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред*, Физматлит, Москва (2005).