Письма в ЖЭТФ, том 106, вып. 9, с. 581 – 584 © 2017 г. 10 ноября

Асимптотический подход к описанию неклассических процессов переноса. Принцип Ферма

П. С. Кондратенко[1)]

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 115191 Москва, Россия

Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Поступила в редакцию 22 сентября 2017 г.
После переработки 9 октября 2017 г.

Предложен метод вычислений распределения концентрации на асимптотически далеких расстояниях от источника примеси в среде, обладающей крупномасштабными неоднородностями. Установлено, что показатель экспоненты $\Gamma \gg 1$ в выражении для концентрации удовлетворяет нелинейному уравнению в частных производных первого порядка. Это позволило при вычислении функции Γ воспользоваться вариационным принципом. Предэкспонента в выражении для концентрации найдена в ведущем приближении по малому параметру Γ^{-1}. Прослеживается аналогия с геометрической оптикой и квазиклассическим приближением в квантовой механике.

DOI: 10.7868/S0370274X1721010X

1. Введение. В последние десятилетия неклассические режимы переноса примеси являются предметом интенсивных исследований [1–4]. Неклассическими (аномальными) принято называть режимы, для которых зависимость размера основной области локализации примеси от времени на больших временах описывается соотношением

$$R(t) \propto t^{\gamma}, \tag{1}$$

в котором, в отличие от классической диффузии, показатель степени $\gamma \neq \frac{1}{2}$. Различают супердиффузионные $\left(\gamma > \frac{1}{2}\right)$ и субдиффузионные $\left(\gamma < \frac{1}{2}\right)$ режимы переноса [2].

Аномальные процессы переноса встречаются в полупроводниках, плазме, космосе и других средах [1–4]. Особое место в этом ряду, с точки зрения практических приложений, занимают геологические среды. Физическими предпосылками неклассических режимов могут быть дальнодействующие корреляции или (и) долговременные релаксации характеристик среды, формирующих процессы переноса. В тех случаях, когда размер $R(t)$ оказывается меньше 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 [1–9]. Между тем реальные среды обладают крупномасштабными неоднородностями. В такой ситуации даже классические процессы адвекции–диффузии требуют выполнения довольно трудоемких численных расчетов. Дополнительные, причем принципиальные, трудности возникают в случае неклассических процессов, для которых управляющие уравнения для концентрации являются интегро-дифференциальными, а входящие туда ядра в деталях остаются неизвестными.

С целью преодоления этих трудностей в настоящей работе предлагается новый подход, базирующийся на асимптотическом описании процессов переноса. Подразумевается важная для практики ситуация, 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 приближение геометрической оптики или квазиклассическое приближение соответственно. В результате возникают значительные упро-

[1)]e-mail: kondrat@ibrae.ac.ru

щения в задаче о процессах переноса. Вывод результатов проведем на примере модели случайной адвекции, демонстрирующей неклассический, супердиффузионный режим переноса [7].

2. Общая структура распределения концентрации на далеких расстояниях. Начнем с анализа важных для дальнейшего вывода характеристик распределения концентрации примеси в однородной среде. В предположении, что источник примеси задан в виде начального условия $c(\mathbf{r},t)|_{t=0} = c(\mathbf{r},0)$, концентрация при $t>0$ определяется выражением

$$c(\mathbf{r},t) = \int d^3r' G(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t)c(\mathbf{r}',0). \tag{2}$$

В модели случайной адвекции функция Грина $G(\mathbf{r},t)$ удовлетворяет условию сохранения полного числа частиц: $\int d^3rG(\mathbf{r},t) = 1$. В представлении Фурье–Лапласа во фрактальной масштабно-инвариантной среде она имеет вид [7]:

$$\begin{gathered} G_{p\mathbf{k}} \equiv \int_0^\infty dte^{-pt}\int d^3re^{-\mathrm{i}\mathbf{kr}}G(\mathbf{r},t) = [p\psi(\eta)]^{-1}; \\ \eta = \frac{k^2}{\kappa^2(p)},\ \kappa(p) = \left(\frac{p}{q}\right)^\gamma,\ q = a^hV. \end{gathered} \tag{3}$$

Параметры a и V в выражении для q имеют порядки, соответственно, характерного размера и скорости адвекции на нижней границе фрактальности, h – фрактальный индекс скорости адвекции. Показатель степени γ устанавливает режим переноса, определяющий зависимость размера основной области локализации примеси от времени (см. (1)). При $h<1$: $\gamma = (1+h)^{-1} > \frac{1}{2}$, и мы имеем дело с режимом супердиффузии. В случае $h>1$ реализуется классическая диффузия с $\gamma = \frac{1}{2}$. При этом $\eta = \frac{Dk^2}{p}$, где $D \sim aV$ – коэффициент диффузии.

Поведение концентрации на асимптотически далеких расстояниях от источника, $r \gg R(t)$, определяется ближайшими к вещественной оси волнового вектора k особенностями Фурье-образа функции Грина. Анализ, проведенный в работе [7], показал, что на вещественной оси волнового вектора k функция $G_{p\mathbf{k}}$ является аналитической, а ее ближайшие к этой оси особенности соответствуют полюсам, лежащим на мнимой оси при $k \approx \pm\mathrm{i}\kappa(p)$. Именно полюс $k \approx +\mathrm{i}\kappa(p)$ определяет поведение концентрации на асимптотически далеких расстояниях. Устраним произвол в выборе параметров a и V, определенных с точностью до множителей порядка единицы, при помощи условия $G^{-1}_{p\mathbf{k}} = [p\psi(-1)] = 0$. Тогда в окрестности точки $\frac{k^2}{\kappa^2(p)} = -1$ имеем:

$$G^{-1}_{p\mathbf{k}} \cong bp\left(\frac{k^2}{\kappa^2(p)}+1\right) \text{ при } \left|\frac{k^2}{\kappa^2(p)}\right| \ll 1,\ b\approx 1. \tag{4}$$

Согласно (3) концентрация примеси в представлении Лапласа $c_p(\mathbf{r}) = \int_0^\infty dte^{-pt}c(\mathbf{r},t)$ при $r \gg R(t)$ имеет вид

$$c_p(r) = N\int\frac{d^3k}{(2\pi)^3}e^{i\mathbf{kr}}G_{p\mathbf{k}}, \tag{5}$$

где $N = \int d^3rc(\mathbf{r},0)$ – полное количество частиц примеси. Производя интегрирование по угловым переменным в (5), приходим к интегралу по вещественной оси переменной k, который после сдвига контура интегрирования в верхнюю полуплоскость приводит к асимптотическому выражению, справедливому при $\kappa(p)r \gg 1$,

$$c_p(r) \cong N\frac{\kappa^2}{4\pi bpr}e^{-\kappa r}, \tag{6}$$

Из соотношения (6) вытекают два следствия. Первое – концентрация на далеких расстояниях убывает экспоненциально. Второе – в силу условия $\kappa r \gg 1$ формирование асимптотики происходит в основном за счет коротковолновой части механизма переноса.

3. Основные результаты. Переходя к рассмотрению процессов переноса в неоднородных средах, учтем, что и в этом случае отмеченное только что свойство спектрального наполнения концентрационной асимптотики сохраняет свою силу. В неоднородных средах входящая в соотношение (2) функция Грина вместо разности $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ станет зависеть от каждого из двух пространственных аргументов по отдельности. В частности, ее можно записать как $G(\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{r}',t)$. Интерес представляет учет неоднородностей среды, масштаб L которых имеет порядок (или меньше) расстояния от точки наблюдения до источника r. Предполагаем выполнение неравенства, $L \gg \kappa^{-1}$. В этом случае первый пространственный аргумент функции $G(\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{r}',t)$ является относительно медленной переменной, а второй – быстрой. Решение задачи будем искать, используя наличие малого параметра $(\kappa L)^{-1}$.

Применительно к асимптотической области в соответствии с (2) концентрация примеси в представлении Лапласа удовлетворяет уравнению:

$$\hat{G}^{-1}_p(\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{r}')c_p(\mathbf{r}) = 0, \tag{7}$$

где $\hat{G}^{-1}_p(\mathbf{r},\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ – оператор, обратный оператору функции Грина в представлении Лапласа.

Учитывая быстроту переменной $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$, перейдем по ней в представление Фурье. В окрестности нуля функция $\hat{G}^{-1}_{p\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ имеет структуру (4) с тем отличием, что входящие туда величины $\kappa(p)$ и b приобретает зависимость от медленной координаты $\mathbf{r}$, т.е.

$$\kappa(p)\to\kappa(p,\mathbf{r})=\left(\frac{p}{q(\mathbf{r})}\right)^{\gamma(\mathbf{r})},\ b\to b(\mathbf{r}). \qquad (8)$$

Принимая во внимание важность указанной окрестности для формирования концентрационной асимптотики, возвращаемся по переменной $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ в координатное представление и в соответствии с оговоренной только что структурой $\hat{G}^{-1}_{p\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ записываем уравнение (7) в форме:

$$(1-\nabla\kappa^{-2}(p,\mathbf{r})\nabla)c_p(\mathbf{r})=0. \qquad (9)$$

Здесь порядок следования дифференциальных операторов обусловлен требованием сохранения полного числа частиц.

Решение уравнения (9) представим как

$$c_p(\mathbf{r})=A_p(\mathbf{r})\exp[-\Gamma(p,\mathbf{r})]. \qquad (10)$$

Экспоненциальный множитель здесь соответствует решению в ведущем приближении по параметру $(\kappa L)^{-1}$. Поэтому функция $\Gamma(p,\mathbf{r})$ удовлетворяет уравнению

$$(\nabla\Gamma(p,\mathbf{r}))^2=\kappa^2(p,\mathbf{r}). \qquad (11)$$

Отсюда имеем

$$\nabla\Gamma(p,\mathbf{r})=\kappa(p,\mathbf{r})\mathbf{v}(p,\mathbf{r}),\quad (\mathbf{v})^2=1. \qquad (12)$$

Решение находим, пользуясь канонической схемой для уравнений в частных производных первого порядка. Ситуация здесь полностью аналогична геометрической оптике. В нашей задаче функция $\Gamma(p,\mathbf{r})$ играет роль эйконала. Отличие от геометрической оптики состоит в том, что показатель экспоненты в (10) является вещественным, а не мнимым. Единичный вектор $\mathbf{v}(p,\mathbf{r})$ направлен по касательной к лучу в точке $\mathbf{r}$. Эйконал $\Gamma(p,\mathbf{r})$ определяется линейным интегралом величины $\kappa(p,\mathbf{r})$ вдоль луча от источника к точке наблюдения

$$\Gamma=\int\limits_0^{\mathbf{r}} dl\kappa(p,\mathbf{r}_l). \qquad (13)$$

Здесь линейное интегрирование ведется по траектории, которая определяется на основе вариационного принципа (аналога принципа Ферма):

$$\delta_l\Gamma(p,\mathbf{r})=0, \qquad (14)$$

dl в (13) – дифференциальный элемент длины траектории луча. Из (14) с учетом (13) вытекает обыкновенное дифференциальное уравнение для траектории луча [10]:

$$\frac{d\mathbf{v}}{dl}=\frac{1}{\kappa}[\nabla\kappa-\mathbf{v}(\mathbf{v}\nabla\kappa)]. \qquad (15)$$

Перейдем к нахождению предэкспоненты $A_p(\mathbf{r})$ в выражении для концентрации (10). Подставляя (10) в (9) с учетом (11), получим выражение

$$2\kappa^{-2}(\nabla\Gamma\nabla A_p)+A_p(\nabla\Gamma\nabla\kappa^{-2})+\kappa^{-2}A_p\mathrm{div}(\kappa\mathbf{v})=0, \qquad (16)$$

в котором мы пренебрегли слагаемыми, имеющими относительную малость $\sim(\kappa L)^{-1}$. Уравнение (16) с учетом выражения (12) преобразуется к обыкновенному линейному дифференциальному уравнению первого порядка

$$\frac{d\ln A_p}{dl}-\frac{1}{2}\frac{d\ln\kappa}{dl}+\frac{1}{2}\mathrm{div}\,\mathbf{v}=0. \qquad (17)$$

Его решением является

$$A_p(\mathbf{r})=B_p\frac{\sqrt{\kappa}}{l(p,\mathbf{r})}\exp\left[-\int\limits_0^{\mathbf{r}}dl\left(\frac{1}{2}\mathrm{div}\,\mathbf{v}-\frac{1}{l(p,\mathbf{r}_l)}\right)\right]. \qquad (18)$$

Константу B_p находим путем сравнения (18) с (6) в пределе $r\ll L$. В итоге, с учетом (10) и (13) находим концентрацию в представлении Лапласа

$$c_p(\mathbf{r})=\frac{N\sqrt{\kappa_0^3\kappa}}{4\pi b_0 pl(\mathbf{r})}\exp\left[-\Gamma(p,\mathbf{r})-\int\limits_0^{\mathbf{r}}dl\left(\frac{1}{2}\mathrm{div}\,\mathbf{v}-l^{-1}\right)\right]. \qquad (19)$$

Здесь $\kappa_0=\kappa(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}\to0}$, $b_0=b(\mathbf{r})|_{\mathbf{r}\to0}$.

Отметим, что для монохроматического излучения в геометрической оптике уравнение, аналогичное (16), которое решалось в другой постановке задачи, было получено в [11].

При выполнении обратного преобразования Лапласа выражения для концентрации

$$c(\mathbf{r},t)=\int\limits_{m-i\infty}^{m+i\infty}\frac{dp}{2\pi i}e^{pt}c_p(\mathbf{r}),\ \mathrm{Re}\,m>0 \qquad (20)$$

интегрирование проводят по переменной p, благодаря неравенству $\Gamma\gg1$, с помощью метода стационарной фазы. В итоге приходим к окончательному результату

$$c(\mathbf{r},t)=\frac{N\sqrt{\kappa_0^3(p_0)\kappa(p_0,\mathbf{r})}}{\sqrt{8\pi}b_0p_0l(p_0,\mathbf{r})}\left|\frac{\partial^2\Gamma(p_0,\mathbf{r})}{\partial p_0^2}\right|^{-1}\times$$

$$\times \exp\left[-\Gamma(p_0,\mathbf{r}) + p_0 t - \int\limits_0^{\mathbf{r}} dl\left(\frac{1}{2}dv\mathbf{v}(p_0,\mathbf{r}_l) - \right.\right.$$
$$\left.\left. - l^{-1}(p_0,\mathbf{r}_l)\right)\right], \qquad (21)$$

где $p_0 = p_0(\mathbf{r}, t)$ – стационарная точка, удовлетворяющая уравнению

$$\frac{\partial\Gamma(p_0,\mathbf{r})}{\partial p_0} = t. \qquad (22)$$

Заметим в итоге, что ключевыми параметрами нашей теории, характеризующими среду, являются γ, q и b (см. (21), (13) и (8)).

4. Заключение. Подводя итог, сформулируем основные результаты. Предложен аналитический метод вычислений распределения концентрации примеси на асимптотически далеких расстояниях в средах, где действуют неклассические процессы переноса. Установлено, что формирование асимптотики обусловлено коротковолновой частью механизма переноса. С учетом того, что зависимость концентрации от расстояния до источника носит экспоненциальный характер с большим показателем экспоненты, задача сведена к нелинейному дифференциальному уравнению в частных производных первого порядка. Формально, таким образом, ситуация напоминает ту, которая имеет место в волновой оптике, когда становится применимым приближение геометрической оптики и действует принцип Ферма [10]. В результате возникают значительные упрощения в описании процессов переноса. Показатель экспоненты в выражении для концентрации находится из вариационного принципа, который является аналогом принципа Ферма в оптике. Предъэкспоненциальный множитель выражен в квадратурах через характеристики неоднородной среды. Вместо интегрального ядра управляющего интегро-дифференциального уравнения в разработанном способе решения задачи о распределении концентрации для неклассического процесса переноса примеси требуется знание всего трех зависящих от координат параметров.

Таким образом, полученные нами результаты открывают новый и одновременно простой путь решения задач о неклассических процессах переноса примеси в средах с крупномасштабными неоднородностями. Подразумевается важная для практики ситуация, когда расстояние от точки наблюдения до источника примеси велико в сравнении с размерами основной области ее локализации в заданный момент времени.

Автор выражает глубокую благодарность Л.В. Матвееву за плодотворное обсуждение результатов. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект # 15-08-05241).

1. J.-P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. **195**, 127 (1990).
2. M. B. Isichenko, Rev. Mod. Phys. **64**, 961 (1992).
3. D. ben-Avraham and S. Havlin, *Diffusion and Reactions in Fractals and Disordered Systems*, University Press, Cambridge (2000), p. 315.
4. Л. М. Зеленый, А. В. Милованов, УФН **174**(8), 809 (2004).
5. И. Л. Драников, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, Доклады Академии Наук **394**, 187 (2004).
6. И. Л. Драников, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, ЖЭТФ **125**, 1082 (2004).
7. A. M. Dykhne, I. L. Dranikov, P. S. Kondratenko, and L. V. Matveev, Phys. Rev. E **72**, 061104 (2005).
8. А. М. Дыхне, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, Письма в ЖЭТФ **80**, 464 (2004).
9. L. Bolshov, P. Kondratenko, L. Matveev, and K. Pruess, Vadose Zone J. **26**, 1152 (2008).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Электродинамика сплошных сред*, Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., М. (1982).
11. Ю. А. Кравцов, Ю. И. Орлов, *Геометрическая оптика неоднородных сред*, Наука, М. (1980).