

АНОМАЛЬНЫЕ РЕЖИМЫ ПЕРЕНОСА ПРИМЕСИ В ФРАКТАЛЬНЫХ СРЕДАХ В ПРИСУТСТВИИ ДИФФУЗИОННОГО БАРЬЕРА

О. А. Дворецкая^{a}, П. С. Кондратенко^{a,b**}*

^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 26 октября 2012 г.

Проанализированы режимы переноса и асимптотические профили концентрации в случайно-неоднородной фрактальной среде в условиях, когда источник примеси окружен слабопроницаемым диффузионным барьером. Установлено, что на относительно малых временах присутствие барьера приводит к значительному замедлению режимов переноса. В отношении асимптотической структуры концентрации действие барьера сохраняется и на больших временах.

DOI: 10.7868/S0044451013040186

1. ВВЕДЕНИЕ

К настоящему моменту накоплен обширный массив данных, свидетельствующих о том, что в сильнонеоднородных средах процессы переноса примеси не всегда описываются классическими закономерностями [1, 2]. В частности, в сравнении с классической диффузией, могут наблюдаться режимы более быстрые (супердиффузия) и более медленные (субдиффузия). В большинстве существующих неклассических моделей переноса источник занимает либо усредненное по неоднородностям среды положение, либо локализован в сильнопроницаемой подсистеме (см., например, [3–6]). Между тем интерес, в том числе и с точки зрения практических приложений, представляют ситуации, когда источник отделен от основной среды диффузионным (слабопроницаемым) барьером. В работе [7] нами были проанализированы режимы переноса и асимптотические профили концентрации в регулярно неоднородной среде с источником в слабопроницаемой подсистеме. В настоящей работе будет рассмотрена более общая задача. Основная (сильнопроницаемая) область теперь представляет собой нерегулярную (случайную)

систему трещин, обладающую фрактальными свойствами; перенос примеси по ней происходит за счет адвекции. Источник примеси локализован в слабопроницаемой матрице, в которой механизмом переноса является диффузия. Поток частиц на границе диффузионного барьера и системы трещин определяет эффективную мощность источника для задачи о переносе примеси по основной области.

Дальнейшая структура статьи состоит в следующем. Раздел 2 посвящен постановке задачи и выводу основных соотношений. Здесь установлена связь между решениями задач о переносе примеси в присутствии диффузионного барьера и без него (задача о безбарьерном прототипе). В разд. 3 проанализировано поведение эффективной мощности источника примеси в зависимости от времени. В разд. 4 изложено решение задачи о безбарьерном прототипе. Раздел 5 посвящен анализу характеристик распределения концентрации примеси в основной области ее локализации. В разд. 6 дан вывод асимптотических выражений для концентрации на далеких расстояниях от источника. В заключительном разд. 7 подведены итоги.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ. ОСНОВНЫЕ СООТНОШЕНИЯ

На рис. 1 схематически изображена пространственная область, по которой происходит перенос

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

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

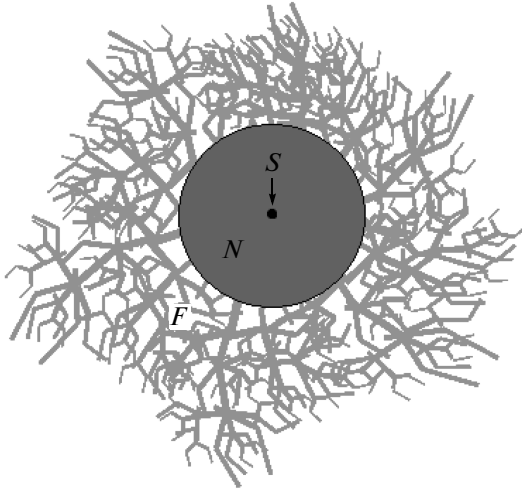


Рис. 1. Геометрия задачи: S — источник примеси, N — ближняя зона, F — дальняя зона

примеси. Источник примеси S , заданный начальным распределением концентрации

$$c(\mathbf{r}, t)|_{t=0} = N_0\delta(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где N_0 — число частиц примеси в начальный момент времени, окружен ближней зоной N , которая заполнена слабопроницаемой средой с коэффициентом диффузии d , где перенос происходит в режиме классической диффузии:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = d\Delta c. \quad (2)$$

Ближняя зона, по сути, является диффузионным барьером. Распространение примеси в дальней зоне F , которая окружает зону N и занимает оставшуюся часть пространства, происходит за счет адвекции по неупорядоченной системе трещин, обладающей фрактальной геометрией. Считаем, что граница между зонами соответствует сфере радиуса a , который совпадает с нижней границей фрактальности системы трещин. Ввиду того, что механизм переноса в дальней зоне существенно более быстрый в сравнении с ближней, концентрация на границе между зонами удовлетворяет условию

$$c(\mathbf{r}, t)|_{r=a} = 0. \quad (3)$$

В дальнейшем частицы примеси, локализованные в системе трещин (дальней зоне), будем называть активными. Нас будут интересовать характеристики их распределения на расстояниях от источника $r \gg a$. Соответственно, ближнюю зону по отношению к дальней можно рассматривать как непрерывно действующий точечный источник, эффективная

мощность которого определяется потоком примеси $Q(t)$ через границу между зонами. Концентрация $c(\mathbf{r}, t)$ активных частиц удовлетворяет уравнению

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{v}c) = Q(t)\delta(\mathbf{r}). \quad (4)$$

Скорость адвекции $v(\mathbf{r})$ является случайной функцией координаты, причем $\langle v(\mathbf{r}) \rangle = 0$. Здесь и далее символ $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по ансамблю реализаций. Поскольку система трещин является фрактальной, корреляции скорости являются дальнедействующими, так что парная корреляционная функция имеет вид

$$K_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}) \equiv \langle v_i(\mathbf{r}_1)v_j(\mathbf{r}_2) \rangle \sim V^2(a/r)^{2h}, \quad \mathbf{r} \gg a, \quad (5)$$

где $\mathbf{r} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, V^2 — характерное значение функции $K_{ij}^{(2)}(\mathbf{r})$ при $\mathbf{r} \sim a$, h — масштабная размерность скорости $v(\mathbf{r})$. Функция (5), будучи масштаб-но-инвариантной, удовлетворяет соотношению

$$K_{ij}^{(2)}(\lambda\mathbf{r}) = \lambda^{-2h} K_{ij}^{(2)}(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где λ — любое безразмерное положительное число. Аналогичными свойствами обладают и корреляционные функции высших порядков.

С учетом линейности задачи (4) среднюю по ансамблю реализаций концентрацию примеси можно представить в виде

$$\langle c(\mathbf{r}, t) \rangle = \int_0^t dt' Q(t-t')G(\mathbf{r}, t'). \quad (7)$$

Здесь $G(\mathbf{r}, t')$ — функция Грина для задачи о безбарьерном прототипе (в отсутствие диффузионного барьера).

В качестве характеристик распределения концентрации активных частиц удобно выбрать их полное число

$$N(t) = \int d\mathbf{r} \langle c(\mathbf{r}, t) \rangle \quad (8)$$

и размер $R(t)$ основной области локализации примеси:

$$R^2(t) = \frac{1}{N(t)} \int d\mathbf{r} \langle c(\mathbf{r}, t) \rangle r^2. \quad (9)$$

Еще одной важной характеристикой является асимптотика концентрации на далеких расстояниях от источника:

$$\langle c(\mathbf{r}, t) \rangle \propto \exp[-\Phi(r, t)], \quad r \gg R(t). \quad (10)$$

Вид функции $\Phi(r, t)$ будет определен ниже.

3. ЭФФЕКТИВНАЯ МОЩНОСТЬ ИСТОЧНИКА

Решение задачи о диффузии, определенной уравнением (2), а также начальным и граничным условиями (1) и (3), приводит к следующему выражению для эффективной мощности источника (определяемой, как было указано выше, потоком частиц примеси к границе между зонами):

$$Q(t) = \frac{N_0}{4t_a} H\left(\frac{t}{4t_a}\right), \quad (11)$$

где $t_a = a^2/4d$ — время диффузии через барьер, а функция $H(u)$ определена равенством

$$H(u) = \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} e^{su} \frac{\sqrt{s}}{\text{sh}\sqrt{s}}, \quad \text{Re } b > 0. \quad (12)$$

Она удовлетворяет условию нормировки

$$\int_0^\infty du H(u) = 1 \quad (13)$$

и в предельных случаях имеет вид

$$H(u) \approx \begin{cases} \frac{\exp(-1/4u)}{2u^{5/2}}, & u \ll 1, \\ 2\pi^2 \exp(-\pi^2 u), & u \gg 1. \end{cases} \quad (14)$$

Таким образом, с учетом выражений (11) и (14) для эффективной мощности на малых и больших временах находим

$$Q(t) \approx N_0 \begin{cases} 4\sqrt{\frac{t_a^3}{t^5}} \exp\left(-\frac{t_a}{4t}\right), & t \ll t_a, \\ \frac{\pi^2}{2t_m} \exp\left(-\pi^2 \frac{t}{4t_a}\right), & t \gg t_a. \end{cases} \quad (15)$$

4. БЕЗБАРЬЕРНЫЙ ПРОТОТИП

В отсутствие барьера перенос примеси описывается уравнением (4) с заменой $Q(t) \rightarrow N_0\delta(t)$. Такая задача соответствует модели изотропной случайной адвекции, исследованной в работе [4], где путем масштабного анализа (скейлинга) были получены основные характеристики распределения концентрации примеси. Ниже на эту задачу мы будем ссылаться как на безбарьерный прототип, а соответствующие характеристики отмечать знаком «*». Функция Грина в задаче о безбарьерном прототипе имеет вид

$$G(r, t) = \frac{F(\zeta)}{R_*^3(t)}, \quad \zeta = \frac{r}{R_*(t)}, \quad (16)$$

$$F(\zeta)|_{\zeta \sim 1} \sim 1, \quad F(\zeta)|_{\zeta \gg 1} \ll 1.$$

При $h > 1$ перенос примеси отвечает режиму супердиффузии, а при $h < 1$ — классической диффузии. Размер основной области локализации примеси есть

$$R_*(t) \sim \left(a^{(1-\gamma)/\gamma} Vt\right)^\gamma, \quad (17)$$

где показатель степени γ определен равенствами

$$\begin{aligned} \gamma &= (1+h)^{-1}, & h < 1, \\ \gamma &= 1/2, & h > 1. \end{aligned} \quad (18)$$

Асимптотические профили концентрации на больших расстояниях $r \gg R_*(t)$ определяются соотношениями

$$\begin{aligned} G(r, t) &\propto \exp\{-\Phi_*(r, t)\}, \\ \Phi_*(r, t) &= \left(\frac{r}{R_*(t)}\right)^{1/(1-\gamma)}. \end{aligned} \quad (19)$$

5. РЕЖИМЫ ПЕРЕНОСА В ПРИСУТСТВИИ ДИФФУЗИОННОГО БАРЬЕРА

Режимы переноса в дальней зоне определяются поведением величин $N(t)$ и $R(t)$, которые были введены в разд. 2. Подстановка соотношения (7) в равенство (8) с учетом выражения (11), а также равенства

$$\int d^3r G(r, t) = 1,$$

вытекающего из присущего модели случайной адвекции свойства сохранения полного числа частиц, дает

$$N(t) = \int_0^t dt' Q(t') = N_0 \int_0^{t/4t_a} du H(u). \quad (20)$$

Отсюда, принимая во внимание предельные выражения (14), получаем полное число активных частиц на малых и больших временах:

$$N(t) \approx N_0 \begin{cases} 4\sqrt{\frac{t_a}{\pi t}} \exp\left(-\frac{t_a}{t}\right), & t \ll t_a, \\ 1, & t \gg t_a. \end{cases} \quad (21)$$

Аналогично выводу выражения (20), из равенства (9) получаем соотношение для размера основной области локализации активных частиц примеси:

$$R^2(t) = \int_0^t dt' Q(t-t') R_*^2(t'). \quad (22)$$

На малых временах, когда $t \ll t_a$, интегралы в (22) набираются в окрестности верхнего предела в

интервале $t' \ll t_a$. В связи с этим при вычислении указанных интегралов на временах $t \ll t_a$ мы можем воспользоваться выражением для функции $Q(t-t')$, получающимся из (15) разложением показателя экспоненты по переменной t' до первого порядка включительно:

$$Q(t-t') \approx Q(t) \exp\left(-\frac{t'}{t_{eff}(t)}\right), \quad t_{eff}(t) = \frac{t^2}{t_a}. \quad (23)$$

Подстановка этой формулы в равенство (22) дает

$$R(t) \sim R_*(t_{eff}). \quad (24)$$

Подставляя сюда качественное соотношение (17), получаем оценку для размера основной области локализации примеси на малых временах во фрактальной среде в присутствии диффузионного барьера:

$$R(t) \sim \left(a^{(1-\gamma)/\gamma} V t_{eff}\right)^\gamma = \left(a^{(1-\gamma)/\gamma} V \frac{t^2}{t_a}\right)^\gamma, \quad t \ll t_a. \quad (25)$$

На временах $t \gg t_a$ интегралы в (22), как следует из асимптотического выражения для величины $Q(t)$ (см. (15)), сходятся в интервале $t-t' \sim t_a$. Поэтому с учетом выражений (11), (13) и (17) получаем оценку для размера основной области локализации примеси на больших временах в задаче с диффузионным барьером:

$$R(t) \sim R_*(t) \sim \left(a^{(1-\gamma)/\gamma} V t\right)^\gamma, \quad t \gg t_a. \quad (26)$$

Отметим, что при $t \ll t_a$, согласно (25), имеем $R(t)/R_*(t) \ll 1$, поскольку на этих временах $t_{eff}(t) \ll t$. Поэтому на малых временах действие барьера приводит к существенному замедлению режима переноса. Вместе с тем на больших временах, когда $t \gg t_a$, присутствие барьера практически не сказывается на режиме переноса. Смена режимов переноса во времени схематически изображена на рис. 2.

6. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ПРОФИЛИ КОНЦЕНТРАЦИИ

Приступая к анализу поведения концентрации на асимптотически далеких расстояниях, заметим, что на малых временах $t \ll t_a$ оба множителя в подынтегральном выражении равенства (7) при подстановке туда (19) являются быстрыми функциями, причем первый из них, $Q(t-t')$, с ростом переменной

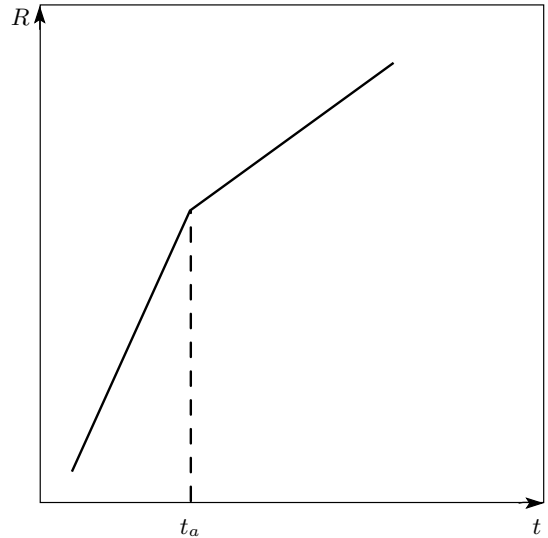


Рис. 2. Режимы переноса в зависимости от времени

интегрирования t' убывает, а второй, $G(r, t')$, — возрастает. Отсюда следует, что подынтегральное выражение в целом имеет резкий максимум, наличие которого позволяет воспользоваться методом перевала. Результат вычислений зависит от соотношения между величинами t_a/t и $\Phi_*(r, t)$. Если первая из них велика в сравнении со второй, то точка перевала \hat{t}' близка к t , и для показателя в экспоненте асимптотического выражения концентрации (10) находим

$$\Phi(r, t) = \frac{t_a}{t} + \frac{1}{\gamma^\gamma (1-\gamma)^{1-\gamma}} \frac{r}{R_*(t_{eff}(t))}, \quad (27)$$

$$\Phi_*(r, t) \frac{t}{t_a} \ll 1.$$

В обратном предельном случае, когда $\Phi_*(r, t) \gg t_a/t$, получаем

$$\Phi(r, t) = 2\sqrt{\frac{\gamma}{1-\gamma} \frac{t_a}{t} \Phi_*(r, t)} + \Phi_*(r, t), \quad (28)$$

$$\Phi_*(r, t) \frac{t}{t_a} \gg 1.$$

Причем это выражение остается справедливым и на больших временах $t \geq t_a$.

Отметим, что при $t \ll t_a$ асимптотическая структура концентрации (концентрационные хвосты) является двухступенчатой, а при $t \gg t_a$ — одноступенчатой. Первые слагаемые в (27) и (28) определяют количество активных частиц, принимающих участие в формировании концентрационных асимптотик. Во всех случаях оно является экспоненциально малым.

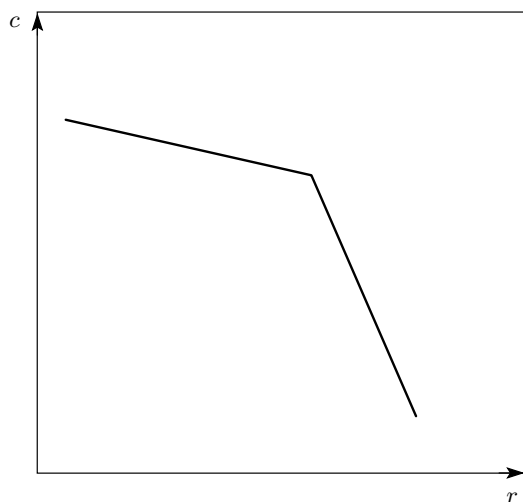


Рис. 3. Двухступенчатая структура концентрационной асимптотики при $t < t_a$

Двухступенчатая структура концентрационной асимптотики при $t < t_a$ схематически изображена на рис. 3.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты работы состоят в следующем.

На относительно малых временах $t \ll t_a$ (t_a — время диффузии через барьер) действие диффузионного барьера приводит к экспоненциальному уменьшению количества активных частиц (сосредоточенных в сильнопроницаемой среде) и значительно замедлению режима переноса. На больших временах, когда $t \gg t_a$, присутствие барьера не сказывается на характере режима переноса.

Асимптотическая структура концентрации на далеких от источника расстояниях на ранних временах ($t \ll t_a$) является двухступенчатой. Первая ступень, отвечающая умеренно далеким расстояниям, соответствует экспоненте, зависимость показателя которой от расстояния является линейной. Следующая ступень асимптотики характеризуется значительно более быстрым убыванием концентрации с расстоянием, которое дополнительно усиливается уменьшением количества активных частиц, формирующих асимптотику концентрации. На поздних временах ($t \gg t_a$) асимптотика концентрации состоит из одной ступени, формируемой активными частицами, которые образовались на временах $t < t_a$.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 12-08-00736-а).

ЛИТЕРАТУРА

1. M. B. Isichenko, Rev. Mod. Phys. **64**, 961 (1992).
2. J.-P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. **195**, 132 (1990).
3. J.-P. Bouchaud, A. Georges, J. Koplik et al., Phys. Rev. Lett. **64**, 2503 (1990).
4. M. Dykhne, I. L. Dranikov, P. S. Kondratenko, and L. V. Matveev, Phys. Rev. E **72**, 061104 (2005).
5. P. S. Kondratenko and L. V. Matveev, Phys. Rev. E **75**, 051102 (2007).
6. P. S. Kondratenko and L. V. Matveev, Phys. Rev. E **83**, 021106 (2011).
7. O. A. Dvoretzkaya and P. S. Kondratenko, J. Phys. A **44**, 465001 (2011).