ЖЭТФ, 2021, том 159, вып. 4, стр. 719–723

АСИМПТОТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ АНИЗОТРОПНОЙ КЛАССИЧЕСКОЙ ДИФФУЗИИ В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

***П. С. Кондратенко*[*], *А. Л. Матвеев*[**], *Ю. Н. Обухов*[***]**

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

Поступила в редакцию 27 сентября 2020 г.,
после переработки 27 сентября 2020 г.
Принята к публикации 29 сентября 2020 г.

Разработана асимптотическая теория классической анизотропной диффузии в неоднородных средах. При выводе использован формализм дифференциальной геометрии, заимствованный из общей теории относительности. Получена простая аналитическая формула для концентрации, элементами которой являются линейные интегралы вдоль геодезической — траектории концентрационного сигнала. Сама траектория вытекает из вариационного принципа, которому удовлетворяет показатель экспоненты в выражении для концентрации, и определяется из обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка для вектора, касательного к геодезической линии. Теория справедлива на расстояниях от источника примеси, значительно превышающих размер основной области ее локализации.

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

DOI: 10.31857/S0044451021040143

1. ВВЕДЕНИЕ

Классическая диффузия в неоднородных средах является практически важной задачей. Численные расчеты по решению уравнения диффузии с переменным в пространстве коэффициентом, особенно для концентрации на далеких расстояниях, являются довольно затратными по ресурсу и времени. В то же время для описания классических процессов [1–3], а также неклассических процессов переноса [4–11] разнообразные аналитические методы (как точные, так и приближенные) широко используются в различных областях естествознания — от физики полупроводников до гидрогеологии.

В работе [12] предложен новый подход к описанию неклассических процессов переноса в средах с крупномасштабными неоднородностями на расстояниях от источника примеси, значительно больших размера основной области ее распределения. Результат для концентрации в [12] сведен к линейным интегралам вдоль специальной кривой — траектории концентрационного сигнала. Эта траектория определяется из вариационного принципа, приводящего к обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка для единичного вектора касательной к самой траектории. Такой подход к теории процессов переноса по форме близок к геометрической оптике в электродинамике [13] (или к квазиклассическому приближению в квантовой механике [14]). При этом роль луча в асимптотической теории переноса играет траектория концентрационного сигнала, а эйконала — показатель экспоненты в выражении для концентрации. Недавно [15] асимптотический подход к описанию процессов переноса, развитый в [12], приложен к классической диффузии в неоднородных средах. В обеих работах — [12, 15] материальная среда, по которой происходит перенос примеси, считалась изотропной.

Цель настоящей работы состоит в том, чтобы обобщить асимптотическую теорию на более общий случай классической диффузии в неоднородных анизотропных средах. Структура статьи следующая. После формулировки задачи в разд. 2 дан вывод формулы для концентрации. В разд. 3 приведено краткое обсуждение. В Приложении выведены результаты для однородной анизотропной среды.

[*] E-mail: kondrat@ibrae.ac.ru
[**] E-mail: alex27_matveev@mail.ru
[***] E-mail: obukhov@ibrae.ac.ru

2. АСИМПТОТИЧЕСКАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ КОНЦЕНТРАЦИИ

Уравнение диффузии в неоднородной анизотропной среде имеет традиционный вид:

$$\partial_t c(\mathbf{r},t) = \partial_i \left(D^{ij}\partial_j c(\mathbf{r},t)\right), \qquad (1)$$

где $c(\mathbf{r},t)$ — концентрация примеси, зависящая от времени t и пространственных координат $\boldsymbol{r} = x^k$, $k = 1, 2, 3$ («радиус-вектор»), и

$$\partial_t = \frac{\partial}{\partial t}, \quad \partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}; \quad D^{ij} = D^{ji} = D^{ij}(\mathbf{r})$$

— симметричный тензор диффузии. Далее мы будем использовать формализм дифференциальной геометрии, который составляет математическую основу общей теории относительности (см. [16]). В частности, напомним правило Эйнштейна, которое предполагает суммирование по одинаковым индексам.

Найдем решение уравнения диффузии (1) для концентрации на далеких расстояниях от источника примеси, используя и обобщая геометрические методы, развитые ранее в работах [12, 15].

Задав начальное условие в форме

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

перепишем уравнение (1) в представлении Лапласа:

$$p\,c_p(\mathbf{r}) - \partial_i \left(D^{ij}\partial_j c_p(\mathbf{r})\right) = N\,\delta(\mathbf{r}). \qquad (3)$$

На асимптотически далеких расстояниях от источника концентрацию примеси, как обычно, ищем в виде

$$c_p(\mathbf{r}) = A_p(\mathbf{r})\,e^{-\Gamma_p(\mathbf{r})}, \quad \Gamma_p(\mathbf{r}) \gg 1. \qquad (4)$$

Отсюда в первом приближении по малому параметру $\propto \Gamma_p^{-1}$ получаем уравнение

$$p - D^{ij}\,(\partial_i\Gamma_p)\,(\partial_j\Gamma_p) = 0. \qquad (5)$$

Введем 3-вектор u^i, касательный к траектории $x^i(s)$ концентрационного сигнала

$$u^i = g^{ij}\,\partial_j\Gamma_p, \qquad (6)$$

где определим эффективную метрику в среде

$$ds^2 = g_{ij}dx^i dx^j. \qquad (7)$$

Компоненты метрического тензора задаются тензором диффузии

$$g^{ij} = \frac{D^{ij}}{p}, \quad g_{ij} = pD_{ij}. \qquad (8)$$

Как обычно D_{ij} обозначает матрицу обратную к D^{ij}:

$$D_{ij}D^{jk} = \delta_i^k.$$

Согласно (6), (8), и (5), имеем нормировку

$$g_{ij}u^i u^j = 1, \qquad (9)$$

т. е. вектор (6) касательной к лучу концентрационного сигнала имеет единичную длину в эффективной метрике (7). Тем самым, квазиэйконал $\Gamma_p(\mathbf{r})$ дается равенством

$$\Gamma_p(\mathbf{r}) = \int\limits_0^{\mathbf{r}} ds = \int\limits_0^{\mathbf{r}} \sqrt{g_{ij}dx^i\,dx^j}. \qquad (10)$$

Интегрирование здесь происходит по траектории концентрационного сигнала, которая определяется из вариационного принципа:

$$\delta\,\Gamma_p(\mathbf{r}) = 0, \qquad (11)$$

откуда получается уравнение для траектории сигнала как геодезической:

$$\frac{d}{ds}u^i + \left\{{}^{\,i}_{jk}\right\} u^j u^k = 0. \qquad (12)$$

Здесь символы Кристоффеля (связность эффективной римановой метрики) определены равенством

$$\left\{{}^{\,i}_{jk}\right\} = \frac{1}{2}g^{il}\left(\partial_j g_{kl} + \partial_k g_{jl} - \partial_l g_{jk}\right). \qquad (13)$$

Отметим, что фактическим параметром разложения, в результате которого мы пришли к уравнению (5), является комбинация $\left(\min(r,L)|\nabla\Gamma_p|\right)^{-1}$, где r — расстояние от источника до точки наблюдения, а L — характерный масштаб длины, на котором заметно меняется коэффициент диффузии. Уравнение для предэкспоненты A_p из (4) получается в следующем порядке малости по параметру $\left(\min(r,L)|\nabla\Gamma_p|\right)^{-1}$ после подстановки (4) в (3):

$$2g^{ij}(\partial_i A_p)(\partial_j\Gamma_p) + A_p(\partial_i g^{ij})(\partial_j\Gamma_p) + {} + A_p g^{ij}\partial_i\partial_j\Gamma_p = 0. \qquad (14)$$

Отсюда с учетом (6) находим

$$2\,\frac{dA_p}{ds} + A_p\,\partial_i u^i = 0. \tag{15}$$

Прежде чем выписать решение уравнения (15), выясним поведение второго слагаемого в нем при $|\mathbf{r}| \ll L$. Подставляя в (6) вытекающее из (10) приближенное равенство

$$\Gamma_p(\mathbf{r}) \approx \sqrt{pD_{ij}x^i x^j}, \tag{16}$$

справедливое при $|\mathbf{r}| \ll L$, получим

$$\partial_i u^i \approx \frac{2}{\sqrt{pD_{ij}x^i x^j}}, \quad |\mathbf{r}| \ll L. \tag{17}$$

С учетом этого соотношения решение уравнения (15) можно представить в форме

$$A_p = B_p \exp\left[-H(\mathbf{r})\right] \Big/ \int\limits_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij}dx^i\,dx^j}, \tag{18}$$

где

$$H(\mathbf{r}) = \int\limits_0^{\mathbf{r}} ds\left(\frac{1}{2}\partial_i u^i - \frac{1}{s}\right). \tag{19}$$

Отметим, что эта величина не зависит от лапласовской переменной, так как p под интегралом в (19) сокращается. Подставляя (18) и (10) в (4) с учетом (8) имеем

$$c_p(\mathbf{r}) = B_p \exp\left\{-\sqrt{p}\int\limits_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij}dx^i\,dx^j} - H(\mathbf{r})\right\} \Big/ \Big/ \int\limits_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij}dx^i\,dx^j}. \tag{20}$$

Константу интегрирования B_p можно фиксировать, перейдя к случаю диффузии в анизотропной однородной среде, который рассмотрен в Приложении. При выполнении неравенства $|\mathbf{r}| \ll L$ выражение (20) должно переходить в соответствующее выражение для однородной среды с постоянным тензором диффузии, равным $D^{ij}(0)$. Поэтому сопоставляя (20) с (A.5) с учетом того, что

$$\int\limits_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij}dx^i\,dx^j} \simeq \sqrt{D_{ij}(0)x^i x^j}, \qquad H(\mathbf{r}) \to 0, \tag{21}$$

при $|\mathbf{r}| \ll L$ находим

$$B_p = \frac{N}{4\pi\sqrt{D_0}}, \quad D_0 = \det\left(D^{ij}(0)\right). \tag{22}$$

Подставляя выражения (22) и (19) в (20) и совершая обратное преобразование Лапласа, приходим к окончательному результату для концентрации примеси при классической диффузии в анизотропной неоднородной среде:

$$c(\mathbf{r},t) = \frac{N}{\sqrt{D_0(4\pi t)^3}} \times \exp\left\{-\frac{1}{4t}\left(\int\limits_0^{\mathbf{r}} \sqrt{D_{ij}dx^i\,dx^j}\right)^2 + \int\limits_0^{\mathbf{r}} ds\left(\frac{1}{s} - \frac{1}{2}\,\partial_i u^i\right)\right\}. \tag{23}$$

Подчеркнем, что интегралы здесь, как и в (18)–(20), берутся вдоль траектории концентрационного сигнала, определяемой уравнением геодезической (12).

3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложено дальнейшее развитие метода вычисления распределения концентрации на асимптотически далеких расстояниях от источника примеси в среде, обладающей анизотропией и крупномасштабными неоднородностями. Установлено, что показатель экспоненты $\Gamma_p \gg 1$ в выражении для концентрации (4) удовлетворяет нелинейному уравнению в частных производных первого порядка (5). Это позволило при вычислении функции $\Gamma_p(\mathbf{r})$ воспользоваться вариационным принципом, в результате чего выражение для функции $\Gamma_p(\mathbf{r})$ свелось к линейному интегралу вдоль траектории концентрационного сигнала, оказавшейся геодезической для эффективной римановой метрики. Тем самым, ясно прослеживается аналогия с геометрической оптикой и квазиклассическим приближением в квантовой механике. Предэкспонента $A_p(\mathbf{r})$ в выражении для концентрации (4) найдена в ведущем приближении по малому параметру $\propto \Gamma_p^{-1}$.

Результатом работы является асимптотическая формула (23) для концентрации примеси при переносе посредством классической анизотропной диффузии в неоднородной среде. Формула справедлива на расстояниях от источника примеси, значительно больше размера основной области ее распределения.

Достоинство формулы в ее простоте. Элементами формулы являются однократные интегралы вдоль траектории концентрационного сигнала, соединяющей источник примеси с точкой наблюдения. Сама траектория есть следствие вариационного принципа и определяется вытекающим из него обыкновенным дифференциальным уравнением первого порядка для единичного касательного вектора.

Возможной областью приложения развитой теории может быть диффузия в неравномерно нагретых кристаллах, где коэффициент диффузии сильно зависит от температуры, а также диффузия в замагниченной плазме.

Предлагаемый метод может быть обобщен на случай неклассических процессов переноса в анизотропных неоднородных средах путем обобщения полученных ранее результатов в работах [12, 17].

Благодарности. Авторы выражают глубокую благодарность Л. В. Матвееву за плодотворное обсуждение результатов.

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

Эту работу авторы посвящают Юбилею Игоря Ехиельевича Дзялошинского, чьим учеником является один из нас (П. С. К.).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Перенос в анизотропной однородной среде

Рассмотрим перенос примеси в анизотропной однородной ($D^{ij} = \mathrm{const}$) среде на основе классической диффузии с начальным условием

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

В этой задаче концентрация в представлении Лапласа имеет вид

$$c_p(\mathbf{r}) = N\int \frac{d^3k}{(2\pi)^3}\,\frac{e^{i\mathbf{kr}}}{p + D^{ij}k_ik_j}. \tag{A.2}$$

После замены переменной интегрирования получаем

$$c_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{(2\pi)^2}\int\limits_0^\infty dq\,q^2\int\limits_0^\pi d\theta\,\sin\theta\,\times$$

$$\times\,\frac{\exp\left[iq\sqrt{D_{ij}x^ix^j}\cos\theta\right]}{\sqrt{D}(p+q^2)},\quad D = \det(D^{ij}). \tag{A.3}$$

Интегрируя по угловой переменной θ, имеем

$$c_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{i(2\pi)^2}\int\limits_{-\infty}^{\infty} dq\,q\,\frac{\exp\left[iq\sqrt{D_{ij}x^ix^j}\right]}{\sqrt{DD_{ij}x^ix^j}(p+q^2)}. \tag{A.4}$$

Далее, интегрируя по переменной q, находим

$$c_p(\mathbf{r}) = \frac{N}{4\pi\sqrt{DD_{ij}x^ix^j}}\,\exp\left[-\sqrt{pD_{ij}x^ix^j}\right]. \tag{A.5}$$

Наконец, выполняя обратное преобразование Лапласа, имеем выражение для концентрации примеси при переносе путем классической диффузии в однородной анизотропной среде

$$c(\mathbf{r},t) = \frac{N}{\sqrt{D(4\pi t)^3}}\,\exp\left[-\frac{D_{ij}x^ix^j}{4t}\right]. \tag{A.6}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Crank, *The mathematics of Diffusion*, 2nd ed., Clarendon Press, Oxford (1975).
2. H. S. Carslaw and J. C. Jaeger, *Conduction of Heat in Solids*, Clarendon Press, Oxford (1959).
3. S. R. de Groot and P. Mazur, *Nonequilibrium Thermodynamics*, North–Holland, New York (1962).
4. Q. Gu, E. A. Schiff, S. Grebner, F. Wang, and R. Schwarz, Phys. Rev. Lett. **76**, 3196 (1996).
5. H. Sher and M. Lax, Phys. Rev. B **7**, 4491 (1973).
6. M. Weiss, H. Hashimoto, and T. Nilsson, Biophysical J. **84**, 4043 (2003).
7. D. S. Banks and C. Fradin, Biophysical J. **89**, 2960 (2005).
8. S. P. Neuman, Water Resources Research **26**, 1749 (1990).
9. M. Sahimi, Phys. Rep. **306**, 213 (1998).

10. J. P. Bouchaud and A. Georges, Phys. Rep. **195**, 127 (1990).

11. L. Bolshov, P. Kondratenko, K. Pruess, and V. Semenov, Vadose Zone J. **7**, 1135 (2008).

12. П. С. Кондратенко, Письма в ЖЭТФ **106**, 581 (2017).

13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Электродинамика сплошных сред. Теоретическая физика*, т. VIII, Наука, Москва (2005).

14. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивистская теория. Теоретическая физика*, т. III, Наука, Москва (2004).

15. П. С. Кондратенко, А. Л. Матвеев, ЖЭТФ **157**, 703 (2020).

16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля. Теоретическая физика*, т. II, Наука, Москва (2014).

17. Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев, УФН **189**, 691 (2019).