

МЕТОДИЧЕСКИЕ ЗАМЕТКИ

Асимптотическая теория классического переноса примеси в неоднородных и нестационарных средах. Формализм Гамильтона

П.С. Кондратенко, Л.В. Матвеев

Развита асимптотическая теория переноса примеси в режиме диффузии – адвекции, когда коэффициент диффузии и скорость адвекции медленно зависят от координат и времени. Концентрация примеси сведена к однократному интегралу по времени. Подынтегральная функция находится из решения обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, аналогичных уравнениям Гамильтона для материальной точки в классической механике.

Ключевые слова: диффузия, адвекция, асимптотика, уравнения Гамильтона

PACS numbers: 05.60.Cd, **05.60. – k**, 02.60.CbDOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2024.09.039764>

Содержание

1. Введение (669).
2. Формулировка задачи (669).
3. Асимптотическая теория (670).
4. Заключение (672).

Список литературы (672).

1. Введение

Задача о переносе примеси в неоднородных средах имеет давнюю историю и остаётся актуальной в настоящее время. Существующие модели переноса получаются путём выполнения подходящих процедур усреднения по неоднородностям малого и среднего масштаба. Если характеристики среды не зависят от координат и времени, теоретические модели переноса позволяют, по крайней мере, в асимптотических пределах найти аналитическое решение для концентрации [1–4]. В противном случае поиск решения для концентрации требует трудоёмких и времязатратных численных расчётов.

В [5] один из авторов предложил новый подход, основанный на асимптотическом описании процессов переноса, учитывающий возможность крупномасштабной зависимости структурных характеристик среды от пространственных координат. Подход основан на том, что согласно всем известным физическим моделям концентрация на асимптотически далёких расстояниях от основ-

ной области своего распределения убывает экспоненциально. Это сделало асимптотическую задачу о переносе примеси похожей на геометрическую оптику и позволило свести её к обыкновенным дифференциальным уравнениям первого порядка и выразить концентрацию через интегралы по траектории концентрационного сигнала (квазилуча). Сама траектория определяется из вариационного принципа, который является аналогом принципа Ферма. Впоследствии асимптотическая теория [5] была применена к конкретным моделям переноса [6, 7]. В [7] было показано, что расчёт концентрации на основе асимптотической теории классической диффузии приводит к экономии времени расчёта на два порядка по сравнению с прямым численным расчётом на основе уравнения диффузии с переменным по пространству коэффициентом диффузии.

Отметим, что метод, предложенный в [5], описывает ситуацию, когда неоднородная среда стационарна. В настоящей работе будет построена асимптотическая теория переноса примеси в классической модели диффузии – адвекции для среды не только неоднородной, но и нестационарной. В разделе 2 сформулирована задача. В разделе 3 дан вывод асимптотической теории и проиллюстрированы её результаты на примерах. В заключительном разделе подводятся итоги.

2. Формулировка задачи

Перенос примеси в модели диффузии – адвекции описывается хорошо известным уравнением

$$\frac{\partial}{\partial t} c(\mathbf{r}, t) + (\mathbf{u} \nabla c(\mathbf{r}, t)) - \operatorname{div} \{ D \nabla c(\mathbf{r}, t) \} = 0, \quad \operatorname{div} \mathbf{u} = 0. \quad (1)$$

Скорость адвекции и диффузия являются функциями координат и времени ($\mathbf{u} = \mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, $D = D(\mathbf{r}, t)$). Концентра-

П.С. Кондратенко^(*), Л.В. Матвеев^(**)

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН,
ул. Большая Тульская 52, 115191 Москва, Российская Федерация
E-mail: ^(*) kondrat@ibrae.ac.ru, ^(**) matweev@ibrae.ac.ru

Статья поступила 14 июня 2024 г.,
после доработки 2 сентября 2024 г.

ция удовлетворяет начальным и граничным условиям

$$c(\mathbf{r}, 0) = N\delta(\mathbf{r}), \quad c(\mathbf{r}, t)|_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} = 0, \quad (2)$$

где N — полное число частиц примеси.

Учитывая экспоненциальный характер убывания на больших расстояниях от основной области распределения, концентрацию удобно представить в виде

$$c(\mathbf{r}, t) = A(\mathbf{r}, t) \exp[-S(\mathbf{r}, t)]. \quad (3)$$

Наша цель — найти выражение для концентрации примеси при выполнении условия

$$S(\mathbf{r}, t) \gg 1. \quad (4)$$

Благодаря этому неравенству в задаче возникает малый параметр:

$$\xi = \max \left\{ (L|\nabla S|)^{-1}, \left(T \left| \frac{\partial S}{\partial t} \right| \right)^{-1} \right\} \ll 1, \quad (5)$$

где L , T — масштабы зависимости характеристик среды от координат и времени соответственно.

Подстановка выражения (3) в уравнение (1) с учётом наличия малого параметра ξ (5) позволит нам получить уравнения для показателя экспоненты $S(\mathbf{r}, t)$ и предэкспоненты $A(\mathbf{r}, t)$.

3. Асимптотическая теория

Уравнения движения. В главном порядке по малому параметру ξ после подстановки выражения (3) в уравнение (1) получается уравнение для показателя экспоненты $S(\mathbf{r}, t)$:

$$\frac{\partial S}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla S) + D(\nabla S)^2 = 0. \quad (6)$$

Требование соответствия нулевому порядку по параметру ξ привело к тому, что данное уравнение не содержит производных от характеристик среды ($\mathbf{u}$ и D) и вторых производных от S . В результате уравнение (6) представляет собой уравнение в частных производных первого порядка. Независимыми переменными в нём являются пространственные координаты и время, поэтому по своей форме уравнение является аналогом уравнения Гамильтона–Якоби для материальной точки в классической механике [8]. В связи с этим при решении уравнения (6) удобно воспользоваться формализмом Гамильтона.

Соответственно, назовём функцию $S(\mathbf{r}, t)$ действием, величину ∇S — импульсом $\mathbf{p}$, а $-\partial S/\partial t$ — функцией Гамильтона $H(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$. Тогда из уравнения (6) получаем

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t) = (\mathbf{u} \mathbf{p}) + D \mathbf{p}^2. \quad (7)$$

В интервале времени $0 < t' < t$ импульс и координата удовлетворяют каноническим уравнениям Гамильтона

$$\frac{dr_i}{dt'} = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \frac{dp_i}{dt'} = -\frac{\partial H}{\partial r_i},$$

которые согласно равенству (7) принимают форму

$$\frac{dr_i}{dt'} = u_i + 2Dp_i, \quad (8)$$

$$\frac{dp_i}{dt'} = -p_k \frac{\partial u_k}{\partial r_i} - \mathbf{p}^2 \frac{\partial D}{\partial r_i}. \quad (9)$$

Векторная константа интегрирования получается из очевидного условия

$$\int_0^t dt' \frac{d\mathbf{r}(t')}{dt'} = \mathbf{r}, \quad (10)$$

которое с учётом уравнения (8) принимает форму

$$\int_0^t dt' [\mathbf{u}(\mathbf{r}(t'), t') + 2D(\mathbf{r}(t'), t') \mathbf{p}(t')] = \mathbf{r}. \quad (11)$$

Действие. Согласно каноническому формализму [8], действие равно

$$S(\mathbf{r}, t) = \int_0^t \mathbf{p} d\mathbf{r}' - \int_0^t dt' H(\mathbf{p}(t'), \mathbf{r}(t'), t'). \quad (12)$$

С учётом уравнения (8) имеем

$$d\mathbf{r}' = \frac{d\mathbf{r}(t')}{dt'} dt' = [\mathbf{u}(\mathbf{r}(t'), t') + 2D(\mathbf{r}(t'), t') \mathbf{p}(t')] dt'. \quad (13)$$

Подставляя равенства (7) и (13) в выражение (12), приходим к окончательному результату для действия

$$S(\mathbf{r}, t) = \int_0^t dt' D(\mathbf{r}(t'), t') \mathbf{p}^2(t'). \quad (14)$$

Подчёркнём, что вывод этого подраздела выполнен в соответствии с общей теорией дифференциальных уравнений в частных производных первого порядка [8].

Предэкспонента и концентрация. Уравнение для предэкспоненты $A(\mathbf{r}, t)$ получается в первом порядке по параметру ξ подстановкой равенства (3) в уравнение (1) путём отбора слагаемых, содержащих только одну первую производную от величин $A(\mathbf{r}, t)$, $D(\mathbf{r}, t)$ (это $\partial A/\partial t$, ∇A и ∇D) или вторые производные от $S(\mathbf{r}, t)$ (это ΔS):

$$\frac{\partial A}{\partial t} + (\mathbf{u} \nabla A) + 2D(\nabla A \nabla S) + A \operatorname{div}(\nabla S) = 0. \quad (15)$$

Подставляя сюда вытекающее из (8) равенство

$$\nabla S = \mathbf{p} = \frac{1}{2D} \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt'} - \mathbf{u} \right) \quad (16)$$

и учитывая свойство $\operatorname{div}(\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)) = 0$, а также равенство

$$\frac{\partial A}{\partial t'} + \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt'} \nabla A \right) = \frac{dA}{dt'}, \quad (17)$$

приходим к уравнению

$$\frac{d \ln A}{dt'} = -\frac{1}{2} \operatorname{div} \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt'} \right). \quad (18)$$

Отсюда получаем

$$A(\mathbf{r}, t) = \frac{B}{t^{3/2}} \exp[-Q(\mathbf{r}, t)], \quad (19)$$

где

$$Q(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int_0^t dt' \left(\operatorname{div} \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt'} \right) - \frac{3}{t'} \right). \quad (20)$$

Здесь мы приняли во внимание, что на достаточно малых временах, когда среду можно считать однородной и стационарной, имеют место приближённые равенства:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt'} \cong \frac{\mathbf{r}}{t'}, \quad \text{div} \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt'} \right) \cong \frac{3}{t'} \quad \text{при } t' \rightarrow 0. \quad (21)$$

Величина B в (19) является постоянной интегрирования. Она находится путём сравнения равенства (19) при $t' \rightarrow 0$ с выражением для концентрации в том же пределе

$$c(\mathbf{r}, t) \cong \frac{N}{(4\pi D_0 t)^{3/2}} \exp \left[-\frac{\mathbf{r}^2}{4D_0 t} \right]; \quad (22)$$

$$B = \frac{N}{(4\pi D_0)^{3/2}}, \quad D_0 \equiv D(0, 0).$$

Подставляя выражение (22) в (19), затем (19) в (3), приходим к окончательному асимптотическому выражению для концентрации примеси при переносе посредством диффузии – адвекции в неоднородной и нестационарной среде:

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{(4\pi D_0 t)^{3/2}} \exp [-S(\mathbf{r}, t) - Q(\mathbf{r}, t)]. \quad (23)$$

Величины $\mathbf{p}(t')$ и $d\mathbf{r}/dt'$, входящие в выражения $S(\mathbf{r}, t)$ и $Q(\mathbf{r}, t)$, определённые равенствами (14) и (20) соответственно, находятся путём решения системы уравнений Гамильтона (8), (9) с учётом соотношения (10).

Частные случаи. Проиллюстрируем результаты разработанной здесь асимптотической теории применительно к трём частным случаям.

Однородно-стационарная среда ($\mathbf{u}, D = \text{const}$).

Путём решения системы уравнений (8)–(10) находим выражения для импульса и скорости:

$$\mathbf{p}(t') = \frac{\mathbf{r} - \mathbf{u}t'}{2Dt'}, \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt'} = \frac{\mathbf{r}}{t'}.$$

Подставляя их в формулы (10) и (20), а затем эти последние в (23), приходим к известному решению задачи (1), (2) для однородной и стационарной среды:

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{u}t)^2}{4Dt} \right]. \quad (24)$$

Однородно-нестационарная среда без адвекции ($\mathbf{u} = 0, D = D(t)$).

Из уравнений (9), (10) получаем выражения для импульса и скорости

$$\mathbf{p}(t') = \frac{\mathbf{r}}{2K(t)}, \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt'} = \frac{D(t')}{K(t)} \mathbf{r}, \quad (25)$$

где

$$K(t) = \int_0^t dt' D(t'). \quad (26)$$

Подставляя выражения (25) в выражения (14) и (20), а затем эти последние в (23), приходим к выражению для

концентрации

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{(4\pi K(t))^{3/2}} \exp \left[-\frac{\mathbf{r}^2}{4K(t)} \right], \quad (27)$$

которое является точным решением задачи при $\mathbf{u} = 0, D = D(t)$.

Стационарно-неоднородная среда без адвекции ($\mathbf{u} = 0, D = D(\mathbf{r})$).

В этих условиях функция Гамильтона является постоянной, и потому согласно (14) и (7) действие равно

$$S(\mathbf{r}, t) = Ht. \quad (28)$$

Обозначим как l длину вдоль линии траектории концентрационного сигнала, определяемой скоростью $d\mathbf{r}(t')/dt'$, с началом $\mathbf{r}(0) = 0$ и окончанием $\mathbf{r}(t')|_{t'=t} = \mathbf{r}$. Тогда имеем очевидное кинематическое соотношение:

$$\int_0^{\mathbf{r}} \frac{dl}{|d\mathbf{r}(t')/dt'|} = t. \quad (29)$$

Здесь и далее интегрирование по длине l происходит вдоль траектории концентрационного сигнала. Из соотношений (7) и (8) получаем выражение для абсолютной величины скорости

$$\left| \frac{d\mathbf{r}(t')}{dt'} \right| = 2\sqrt{HD(\mathbf{r}(t'))}, \quad (30)$$

после подстановки (30) в равенство (29) находим величину функции Гамильтона

$$H = \frac{1}{4t^2} \left(\int_0^{\mathbf{r}} \frac{dl}{\sqrt{D(\mathbf{r})}} \right)^2,$$

последующая подстановка которой в (28) приводит к результату для действия:

$$S(\mathbf{r}, t) = \frac{\psi^2(\mathbf{r})}{4D_0 t}, \quad (31)$$

где

$$\psi(\mathbf{r}) = \int_0^{\mathbf{r}} dl n(l), \quad (32)$$

и

$$n(l) = \sqrt{\frac{D_0}{D(l)}}. \quad (33)$$

Приступим теперь к выводу уравнения для линии траектории концентрационного сигнала. Обозначим $\mathbf{v} = \mathbf{v}(l)$ — единичный вектор касательной к указанной линии. Учитывая очевидные равенства

$$\frac{dl}{dt} = \left| \frac{d\mathbf{r}(t')}{dt'} \right| \quad \text{и} \quad \mathbf{v} = \frac{\mathbf{p}}{p},$$

имеем

$$\frac{d\mathbf{v}}{dl} = \frac{1}{2Dp} \frac{d}{dt} \left(\frac{\mathbf{p}}{p} \right). \quad (34)$$

Раскрывая входящие сюда производные с помощью уравнения (9) (при $\mathbf{u} = 0$), приходим к уравнению

$$\frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{1}{n} (\nabla n - \mathbf{v}(\mathbf{v} \cdot \nabla n)). \quad (35)$$

Выражение (31) для действия (показателя экспоненты в формуле (3)) и уравнение для траектории концентрационного сигнала (35) совпадают с теми, что в рамках асимптотической теории переноса в стационарно-неоднородных средах были получены в работе [7].

Осталось теперь величину $Q(\mathbf{r}, t)$, определённую формулой (20), представить в терминах асимптотической теории для стационарно-неоднородной среды (32), (33). Воспользовавшись вытекающими из (28), (30) и (31) довольно очевидными соотношениями

$$\begin{aligned} d\psi &= n dl, \quad \frac{dl}{dt'} = \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt'} \right|, \quad \frac{d\mathbf{r}}{dt'} = \mathbf{v} \left| \frac{d\mathbf{r}}{dt'} \right|, \\ dt' &= \frac{d\psi}{2\sqrt{HD_0}}, \quad t' = \frac{\psi}{2\sqrt{HD_0}}, \quad n^{-1}(\mathbf{v} \cdot \nabla) = \frac{d}{d\psi}, \end{aligned} \quad (36)$$

выражение (20) преобразуем к виду

$$Q(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2} \int_0^{\mathbf{r}} d\psi \left(\operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{v}}{n} \right) - \frac{2}{\psi} \right). \quad (37)$$

Подставляя выражения (31) и (37) в формулу (23), приходим к асимптотическому выражению для концентрации при классическом переносе примеси в стационарно-неоднородной среде

$$c(\mathbf{r}, t) = \frac{N}{(4\pi D_0 t)^{3/2}} \exp \left[-\frac{\psi^2(\mathbf{r})}{4D_0 t} - \frac{1}{2} \int_0^{\mathbf{r}} d\psi \left(\operatorname{div} \left(\frac{\mathbf{v}}{n} \right) - \frac{2}{\psi} \right) \right], \quad (38)$$

ранее полученному в работе [7].

4. Заключение

Результатом работы является асимптотическая теория переноса примеси в неоднородной и нестационарной среде в режиме диффузии–адвекции. Теория основана на идее об экспоненциальной структуре концентрации на асимптотически далёких расстояниях от основной области распределения примеси. Концентрация выражена через однократный интеграл по времени. Подынтегральная функция находится из решения системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, которые являются аналогом уравнений Гамильтона в классической механике материальной точки.

Ожидается, что при решении задач переноса примеси через неоднородную и нестационарную среду на основе предложенной асимптотической теории будет достигнута значительная экономия (на два и более порядка) расчётного времени по сравнению с прямым численным расчётом уравнения в частных производных второго порядка.

Одним из приложений развитой здесь асимптотической теории может быть анализ долговременных процессов переноса в геологических структурах с целью обоснования надёжности захоронений радиоактивных отходов.

Список литературы

1. Dykhne A M, Dranikov I L, Kondratenko P S, Matveev L V *Phys. Rev. E* **72** 061104 (2005)
2. Kondratenko P S, Matveev L V *Phys. Rev. E* **75** 051102 (2007)
3. Kondratenko P S, Matveev L V *Phys. Rev. E* **83** 021106 (2011)
4. Большов Л А, Кондратенко П С, Матвеев Л В *УФН* **189** 691 (2019); Bolshov L A, Kondratenko P S, Matveev L V *Phys. Usp.* **62** 649 (2019)
5. Кондратенко П С *Письма в ЖЭТФ* **106** 581 (2017); Kondratenko P S *JETP Lett.* **106** 604 (2017)
6. Kondratenko P S *Ann. Physics* **447** 169002 (2022)
7. Kondratenko P S, Matveev A L, Vasiliev A D *Eur. Phys. J. B* **94** 50 (2021)
8. Ландау Л Д, Лифшиц Е М *Механика* (М.: Физматлит, 2001); Пер. на англ. яз.: Landau L D, Lifshitz E M *Mechanics* (Oxford: Pergamon Press, 1976)

Asymptotic theory of classical tracer transport in inhomogeneous and nonstationary media. Hamilton's formalism

P.S. Kondratenko^(*), L.V. Matveev^(**)

Nuclear Safety Institute, Russian Academy of Sciences, ul. Bol'shaya Tul'skaya 52, 115191 Moscow, Russian Federation

E-mail: ^(*) kondrat@ibrae.ac.ru, ^(**) matveev@ibrae.ac.ru

We develop an asymptotic theory of tracer transport due to diffusion and advection, when the diffusivity and advection velocity vary slowly over space and time. The tracer concentration is expressed through a single time integral. The integrand is determined by solving first-order ordinary differential equations, which are similar to Hamilton's equations for a material point in classical mechanics.

Keywords: diffusion, advection, asymptotic form, Hamilton's equations

PACS numbers: 02.60.Cb, 05.60.Cd, **05.60. – k**

Bibliography — 8 references

Uspekhi Fizicheskikh Nauk **195** (6) 669–672 (2025)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNr.2024.09.039764>

Received 14 June 2024, revised 2 September 2024

Physics – Uspekhi **68** (6) (2025)

DOI: <https://doi.org/10.3367/UFNe.2024.09.039764>