

Диффузия в течении с линейно-неоднородным профилем скорости

В. П. Лахин

Российский научный центр “Курчатовский институт”, Институт ядерного синтеза, 123182 Москва, Россия

Поступила в редакцию 27 марта 2007 г.

Методами группового анализа найдена функция Грина в бесконечном пространстве уравнения диффузии пробных частиц в течении с линейно-неоднородным профилем скорости. С ее использованием найдены решения задачи Коши для некоторых частных начальных условий.

PACS: 02.20.Hj, 52.25.Fi, 66.10.Cb

Рассмотрим задачу о движении пробных частиц в течении с линейно-неоднородным профилем скорости $\mathbf{v} = v_0(1 + x/a)\mathbf{e}_y$ при наличии молекулярной вязкости D . Двумерная эволюция концентрации таких частиц в плоскости (x, y) описывается адвективно-диффузионным уравнением

$$n_t + v_0(1 + x/a)n_y - D(n_{xx} + n_{yy}) = 0. \quad (1)$$

Величины n_i и n_{ij} означают частные производные концентрации n по соответствующим переменным x, y, t . Будем искать точечные симметрии этого уравнения, задаваемые инфинитезимальным оператором

$$\hat{X} = \xi^i(\mathbf{x}, n) \frac{\partial}{\partial x_i} + \eta(\mathbf{x}, n) \frac{\partial}{\partial n}, \quad (2)$$

где $\mathbf{x} = (x, y, t)$, $i = (x, y, t)$. Здесь и далее предполагается суммирование по повторяющемуся дважды индексу i . Согласно алгоритму Ли [1], точечные симметрии уравнения (1) определяются из условия

$$\eta_i^{(1)} + v_0(1 + x/a)\eta_y^{(1)} + (v_0/a)\xi^x n_y - D(\eta_{xx}^{(2)} + \eta_{yy}^{(2)}) = 0, \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \eta_i^{(1)} &= D_i \eta - n_j (D_i \xi^j), \\ \eta_{ij}^{(2)} &= D_j \eta_i^{(1)} - n_{il} (D_j \xi^l), \end{aligned} \quad (4)$$

а дифференциальный оператор D_i , означающий полную производную по переменной x_i , описывается выражением

$$D_i = \frac{\partial}{\partial x_i} + n_i \frac{\partial}{\partial n} + n_{ij} \frac{\partial}{\partial n_j}. \quad (5)$$

При этом первые и вторые производные концентрации n_i и n_{ij} рассматриваются как независимые переменные, на которые накладывается связь, описываемая исходным адвективно-диффузионным уравнением (1).

Решая систему уравнений (1), (3), находим 6-параметрическую группу симметрий уравнения (1):

$$\begin{aligned} \hat{X}_1 &= \frac{\partial}{\partial t}, \quad \hat{X}_2 = \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{X}_3 = \frac{\partial}{\partial x} + \frac{v_0 t}{a} \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{X}_4 = n \frac{\partial}{\partial n}, \\ \hat{X}_5 &= t \frac{\partial}{\partial x} + \frac{v_0 t^2}{2a} \frac{\partial}{\partial y} - \frac{x n}{2D} \frac{\partial}{\partial n}, \\ \hat{X}_6 &= -\frac{v_0 t^2}{2a} \frac{\partial}{\partial x} + t \left(1 - \frac{v_0^2 t^2}{6a^2} \right) \frac{\partial}{\partial y} - \\ &- \frac{n}{2D} \left[y - v_0 t \left(1 + \frac{x}{a} \right) \right] \frac{\partial}{\partial n}. \end{aligned} \quad (6)$$

Первые два инфинитезимальных генератора \hat{X}_1 и \hat{X}_2 соответствуют инвариантности уравнения по отношению к сдвигам по времени и по координате y . Генератор \hat{X}_3 описывает преобразование, затрагивающее лишь переменные x и y : $x \rightarrow x + \alpha, y \rightarrow y + (v_0 t/a)\alpha$. Генератор \hat{X}_4 описывает инвариантность уравнения по отношению к преобразованию подобия $n \rightarrow \alpha n$.

Построим инвариантное решение уравнения (1) для генератора \hat{X}_5 . Для отыскания инвариантного решения используем метод характеристик. Характеристики определяются уравнениями

$$\frac{dx}{t} = \frac{dy}{v_0 t^2 / 2a} = \frac{dt}{0} = -\frac{2Ddn}{xn}. \quad (7)$$

Решая эти уравнения, находим три инварианта:

$$C_1 = t, \quad C_2 = y - \frac{v_0}{2a} x t, \quad C_3 = n \exp(x^2 / 4Dt). \quad (8)$$

Тогда инвариантное решение уравнения (1) записывается в виде

$$n(x, y, t) = e^{-x^2 / 4Dt} \phi(t, z), \quad z \equiv y - \frac{v_0}{2a} x t. \quad (9)$$

Подставляя уравнение (9) в (1), получаем

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + v_0 \frac{\partial \phi}{\partial z} + \frac{\phi}{2t} - D \left(1 + \frac{v_0^2 t^2}{4a^2} \right) \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0. \quad (10)$$

Переходя в систему координат, движущуюся по z со скоростью v_0 , и производя замену $\phi = \psi/\sqrt{t}$, приводим уравнение (10) к уравнению теплопроводности с коэффициентом теплопроводности, зависящим от времени:

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} - D \left(1 + \frac{v_0^2 t^2}{4a^2} \right) \frac{\partial^2 \psi}{\partial \zeta^2} = 0. \quad (11)$$

Здесь $\zeta = z - v_0 t$. Решение этого уравнения при $t > 0$, ограниченное при $\zeta \rightarrow \pm\infty$, имеет вид

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{Dt(1 + v_0^2 t^2/12a^2)}} \exp\left(-\frac{\zeta^2}{4Dt(1 + v_0^2 t^2/12a^2)}\right). \quad (12)$$

Учитывая уравнения (9) и (12), а также инвариантность уравнения (1) по отношению к масштабному преобразованию n , запишем его инвариантное решение в виде

$$n(x, y, t) = \frac{\theta(t)}{4\pi Dt \sqrt{1 + v_0^2 t^2/12a^2}} \times \exp\left\{-\frac{x^2}{4Dt} - \frac{(y - v_0 t - v_0 x t/2a)^2}{4Dt(1 + v_0^2 t^2/12a^2)}\right\}, \quad (13)$$

где $\theta(t)$ – ступенчатая функция Хевисайда. Это решение является фундаментальным решением или функцией Грина адвективно-диффузионного уравнения. Действительно, функция $n(x, y, t)$ является решением уравнения

$$n_t + v_0(1 + x/a)n_y - D(n_{xx} + n_{yy}) = \delta(t). \quad (14)$$

Здесь $\delta(t)$ – дельта-функция Дирака. Функция $n(x, y, t)$ неотрицательна, обращается в нуль при $t < 0$, бесконечно дифференцируема при $(x, y, t) \neq (0, 0, 0)$ и локально интегрируема в пространстве (x, y, t) . Более того,

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} n dx dy = 1, \quad t > 0, \quad (15)$$

и при $t \rightarrow +0$

$$\lim_{t \rightarrow +0} n(x, y, t) = \lim_{t \rightarrow +0} \frac{1}{4\pi Dt} \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4Dt}\right) = \delta(x)\delta(y). \quad (16)$$

При переходе к последнему равенству учтено, что

$$\lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \frac{\alpha}{\sqrt{\pi}} e^{-\alpha^2 x^2} = \delta(x). \quad (17)$$

В силу своей нормировки n есть вероятность найти в момент времени $t > 0$ в точке (x, y) пробную частицу, находившуюся в начальный момент времени $t = 0$ в точке $(0, 0)$.

Используем решение (13) для вычисления в качестве иллюстрации среднеквадратичных смещений при $t > 0$ пробной частицы, находившейся в момент времени $t = 0$ в точке $(0, 0)$. Тогда среднеквадратичное смещение пробной частицы поперек направления течения определяется соотношением

$$\begin{aligned} \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 n(x, y, t) dx dy = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 n(x, z, t) dx dz = \\ &= \frac{1}{4\pi Dt \sqrt{1 + v_0^2 t^2/12a^2}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/4Dt} dx \times \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2/4Dt(1 + v_0^2 t^2/12a^2)} dz = 2Dt. \end{aligned} \quad (18)$$

Здесь $z \equiv y - v_0 t - v_0 x t/2a$. Как и следовало ожидать, в направлении, перпендикулярном направлению течения, движение пробной частицы чисто диффузионное и определяется молекулярным коэффициентом диффузии D .

Иная ситуация имеет место для среднеквадратичного смещения пробной частицы в направлении, параллельном направлению течения. В системе отсчета, движущейся со средней скоростью течения v_0 , для $\bar{y} = y - v_0 t$ имеем

$$\begin{aligned} \langle \bar{y}^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{y}^2 n(x, \bar{y}, t) dx d\bar{y} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (z + v_0 x t/2a)^2 n(x, z, t) dx dz = \\ &= \frac{1}{4\pi Dt \sqrt{1 + v_0^2 t^2/12a^2}} \times \\ &\quad \times \left(\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-x^2/4Dt} dx \int_{-\infty}^{+\infty} z^2 e^{-z^2/4Dt(1 + v_0^2 t^2/12a^2)} dz + \right. \\ &\quad \left. + \frac{v_0^2 t^2}{4a^2} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/4Dt} dx \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-z^2/4Dt(1 + v_0^2 t^2/12a^2)} dz \right) = \\ &= 2Dt(1 + v_0^2 t^2/3a^2). \end{aligned} \quad (19)$$

В направлении течения в системе отсчета, движущейся со средней скоростью течения v_0 , движение

пробной частицы есть комбинация диффузии (первый член в уравнении (19)), которая преобладает на малых временах $t \ll a\sqrt{3}/v_0$, и супердиффузии (член, пропорциональный t^3), которая является комбинированным эффектом неоднородности скорости течения и молекулярной диффузии.

Если характерный размер канала, в котором происходит течение, сравним с длиной неоднородности a , то диффузия в направлении x приведет к попаданию пробной частицы на стенку за характерное время $t_d = a^2/2D$. Тогда уравнение (19) позволяет оценить эффект супердиффузии в терминах эффективного коэффициента диффузии:

$$D^* = D + \frac{v_0^2 D}{3a^2} t_d^2 = D + \frac{a^2 v_0^2}{12D}. \quad (20)$$

Как и логично было предположить, вид эффективного коэффициента диффузии схож по своей структуре с коэффициентом эффективной диффузии в течении Пуазейля, найденным в работах Тэйлора [2, 3].

Наконец, в отличие от случая течения с однородным профилем течения, не равна нулю величина $\langle x\bar{y} \rangle$:

$$\begin{aligned} \langle x\bar{y} \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x\bar{y}n(x, \bar{y}, t) dx d\bar{y} = \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} x(\bar{z} + v_0 x t/2a)n(x, \bar{z}, t) dx d\bar{z} = \\ &= \frac{v_0 t/2a}{4\pi D \sqrt{t(t + v_0^2 t^3/12a^2)}} \int_{-\infty}^{+\infty} x^2 e^{-x^2/4Dt} dx \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\bar{z}^2/4D(t + v_0^2 t^3/12a^2)} d\bar{z} = \frac{v_0 t^2}{2a}. \quad (21) \end{aligned}$$

Это означает, что имеет место “косая” супердиффузия, что является отражением того обстоятельства, что в системе отсчета, движущейся в каждой точке со скоростью течения, $z = y - v_0 t(1 + x/a)$, уравнение (1) принимает вид уравнения диффузии с тензорным коэффициентом диффузии, зависящим от времени:

$$n_t - Dn_{xx} + 2D(v_0 t/a)n_{xz} - D(1 + v_0^2 t^2/a^2)n_{zz} = 0. \quad (22)$$

Заметим, что найденные выше выражения для временной зависимости среднеквадратичных смещений могут быть легко получены, не решая уравнения (1), а перейдя в нем в систему координат, движущуюся

вдоль оси y со средней скоростью течения v_0 , проинтегрировав его с весами x^2 , \bar{y}^2 и $x\bar{y}$ и решая полученную систему уравнений относительно величин $\langle x^2 \rangle$, $\langle \bar{y}^2 \rangle$ и $\langle x\bar{y} \rangle$.

Поскольку один из коэффициентов уравнения (1) зависит от координаты x , то оно не инвариантно по отношению к простому сдвигу по этой координате. Это не позволяет записать решение задачи с начальными условиями в виде стандартной свертки, а необходимо аккуратно учесть пространственную симметрию, описываемую оператором \hat{X}_3 . Последовательно применяя к x, y преобразования переменных, задаваемые операторами \hat{X}_2 и \hat{X}_3 , приходим к следующему преобразованию переменных:

$$x' = x - \xi, \quad y' = y - \zeta - \frac{v_0}{a} t \xi, \quad (23)$$

где ξ и ζ – константы. Уравнение (1) инвариантно по отношению к такой замене переменных, поэтому, если $n(x, y, t)$ – решение уравнения, то и $n(x', y', t)$ также является решением адвективно-диффузионного уравнения. Таким образом, находим из уравнений (13) и (23) следующее решение уравнения (1)

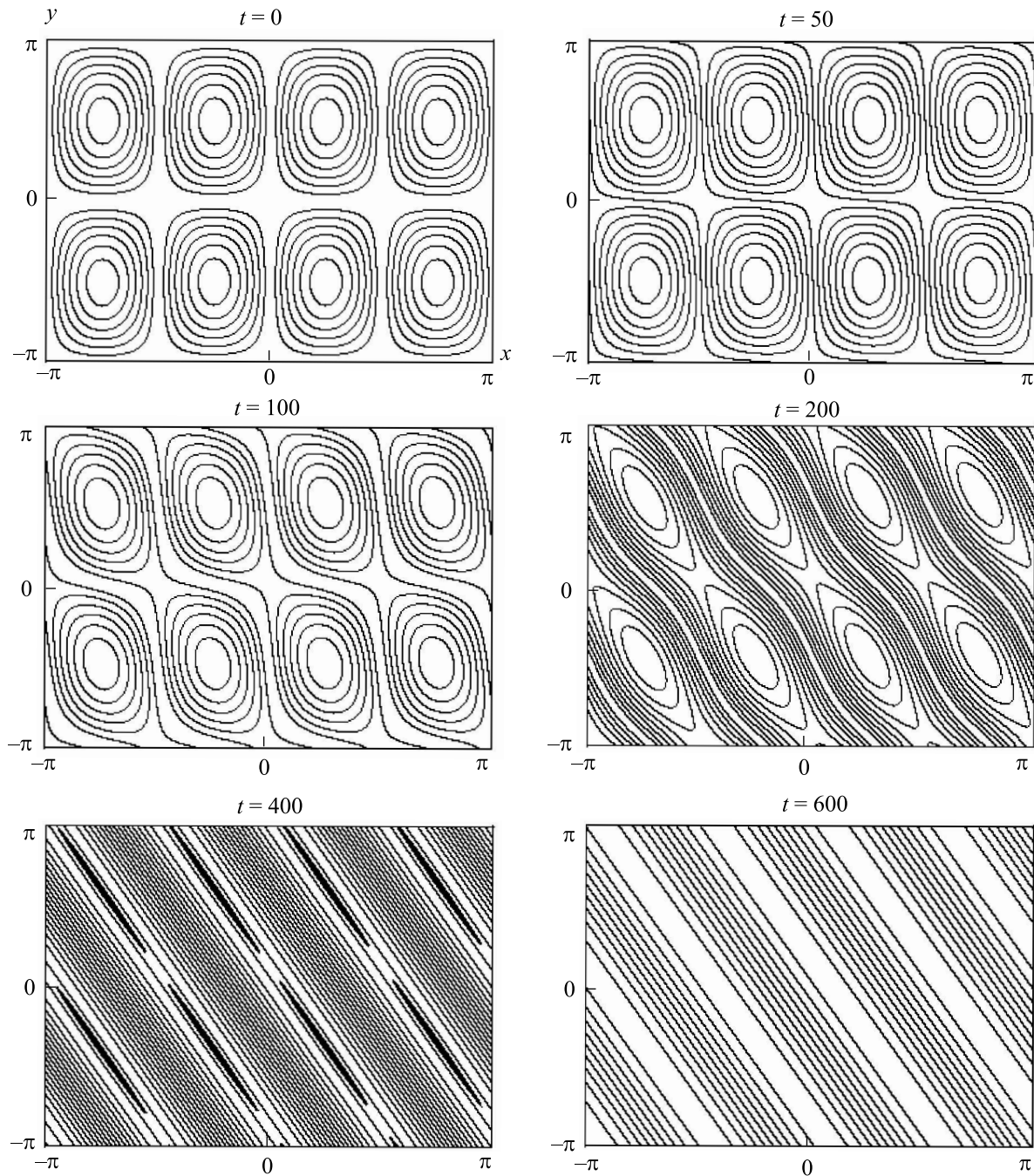
$$\begin{aligned} G(x, \xi; y, \zeta; t) &= \\ &= \frac{\theta(t)}{4\pi Dt \sqrt{1 + v_0^2 t^2/12a^2}} \exp \left\{ -\frac{(x - \xi)^2}{4Dt} - \right. \\ &\left. - \frac{[y - \zeta - v_0 t(1 + x/a) + (v_0/2a)(x - \xi)t]^2}{4Dt(1 + v_0^2 t^2/12a^2)} \right\}. \quad (24) \end{aligned}$$

Используя это обстоятельство, можно найти решение задачи Коши для уравнения (1), которая формулируется следующим образом: найти пространственно-ограниченное при $t > 0$ решение, если $n(x, y, 0) = f(x, y)$. Это решение представляется в виде свертки:

$$\begin{aligned} n(x, y, t) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi d\zeta f(\xi, \zeta) G(x, \xi; y, \zeta; t) = \\ &= \frac{\theta(t)}{4\pi Dt \sqrt{1 + v_0^2 t^2/12a^2}} \times \\ &\times \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi d\zeta f(\xi, \zeta) \exp \left\{ -\frac{(x - \xi)^2}{4Dt} - \right. \\ &\left. - \frac{[y - \zeta - v_0(1 + x/a)t + (v_0/2a)(x - \xi)t]^2}{4Dt(1 + v_0^2 t^2/12a^2)} \right\}. \quad (25) \end{aligned}$$

В качестве примера рассмотрим эволюцию сгустка пробных частиц с гауссовым пространственным распределением в направлениях x и y :

$$n(x, y, 0) = n_0 \exp(-x^2/d_1^2 - y^2/d_2^2). \quad (26)$$



Линии уровня концентрации $n(x, y) = \text{const}$ в различные моменты времени

Подставляя уравнение (26) в формулу (25), после довольно громоздких вычислений приходим к следующему результату:

$$n(x, y, t) = n_0 \frac{d_1 d_2}{L^2} \exp \left[-\frac{x^2}{d_1^2 + 4Dt} - \frac{d_1^2 + 4Dt}{L^4} \left(y - v_0 t - \frac{v_0 t}{a} x \frac{d_1^2 + 2Dt}{d_1^2 + 4Dt} \right)^2 \right], \quad (27)$$

где

$$L^4 \equiv d_1^2 d_2^2 + 4Dt \left[d_1^2 \left(1 + \frac{v_0^2 t^2}{3a^2} \right) + d_2^2 \right] + (4Dt)^2 \left(1 + \frac{v_0^2 t^2}{12a^2} \right). \quad (28)$$

В предельном случае $d_1^2 \rightarrow +\infty$ получаем решение задачи с начальным распределением пробных частиц,

зависевшим в начальный момент времени только от y , $n(x, y, 0) = n_0 \exp(-y^2/d_2^2)$:

$$n(x, y, t) = n_0 \frac{d_2}{\sqrt{d_2^2 + 4Dt(1 + v_0^2 t^2/3a^2)}} \times \exp\left\{-\frac{[y - v_0(1 + x/a)t]^2}{d_2^2 + 4Dt(1 + v_0^2 t^2/3a^2)}\right\}. \quad (29)$$

Как видно из формулы (29), происходит снос пробных частиц течением с одновременным расплыванием первоначального сгустка. Распределение частиц в сгустке остается гауссовым в системе отсчета, движущейся в каждой точке со скоростью течения, но при этом характерный пространственный масштаб гауссова распределения увеличивается по временному закону:

$$l(t) = [d_2^2 + 4Dt(1 + v_0^2 t^2/3a^2)]^{1/2}, \quad (30)$$

что соответствует супердиффузии (ср. с уравнением (19)).

Наконец, приведем решение задачи об эволюции начального распределения пробных частиц в виде периодической решетки

$$n(x, y, 0) = n_0 \sin kx \sin qy. \quad (31)$$

Для такого начального распределения получаем

$$n(x, y, t) = \frac{n_0}{2} \exp\left[-k^2 Dt - q^2 Dt \left(1 + \frac{v_0^2 t^2}{3a^2}\right)\right] \times \left\{ \exp\left(-kqD \frac{v_0 t^2}{a}\right) \cos[kx - q(y - v_0 t(1 + x/a))] - \exp\left(kqD \frac{v_0 t^2}{a}\right) \cos[kx + q(y - v_0 t(1 + x/a))] \right\}. \quad (32)$$

Отметим, что в предельном случае однородного течения, $a \rightarrow \infty$, из уравнения (32) следует, что первоначальная решетка просто сносится течением с одновременным убыванием её амплитуды по временному закону $n_0 \exp(-k^2 Dt - q^2 Dt)$. При наличии линейной неоднородности скорости помимо сноса решетки течением и убывания амплитуды, связанного с молекулярной диффузией и супердиффузией, имеет место изменение пространственной структуры периодической решетки, обусловленное “косой” диффузией. При $kqv_0 > 0$ на временных масштабах $t > (a/kqv_0 D)^{1/2}$ выживает лишь второй член в фигурных скобках в уравнение (32). Характерная картина эволюции периодической решетки пробных частиц в системе координат, связанной со средней скоростью течения, представлена на рисунке для случая, когда “косая” диффузия преобладает над конвективным

сносом. Параметры течения и периодической решетки выбраны следующим образом: $v_0 = 0.001$, $D = 0.1$, $a = 10$, $k = 2$, $q = 1$. При этом характерное время “косой” диффузии $t_1 = \sqrt{a/kqv_0 D} = 2.23 \cdot 10^2$, а характерное время искажения структуры решетки из-за неоднородности профиля скорости течения $t_2 = ak/qv_0 = 2 \cdot 10^4$. Видно, что на временах порядка t_1 начинает происходить существенное изменение линий уровня концентрации, обусловленное “косой” диффузией пробных частиц. При этом конвективный снос все ещё не играет существенной роли. При $t \geq t_1$ первый член в фигурных скобках в выражении (32) становится пренебрежимо малым, и линии уровня концентрации $n(x, y)$ превращаются в прямые линии:

$$kx + q(y - v_0 t(1 + x/a)) = \text{const}. \quad (33)$$

Это обстоятельство и отражается на рисунке в моменты времени $t = 400$ и $t = 600$.

При наличии в правой части уравнения (1) источника пробных частиц

$$n_t + v_0(1 + x/a)n_y - D(n_{xx} + n_{yy}) = Q(x, y, t), \quad (34)$$

к правой части уравнения (25) следует прибавить частное решение неоднородного уравнения, обращаемое в нуль при $t = 0$:

$$n(x, y, t) = \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi d\zeta d\tau Q(\xi, \zeta, \tau) G(x, \xi; y, \zeta; t - \tau) = \int_0^t \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} d\xi d\zeta d\tau \frac{Q(\xi, \zeta, \tau)}{4\pi D(t-\tau)\sqrt{1+v_0^2(t-\tau)^2/12a^2}} \times \exp\left\{-\frac{(x-\xi)^2}{4D(t-\tau)} - \frac{[y-\zeta-v_0(1+x/a)(t-\tau)+(v_0/2a)(x-\xi)(t-\tau)]^2}{4D(t-\tau)(1+v_0^2(t-\tau)^2/12a^2)}\right\}. \quad (35)$$

Резюмируя вышесказанное, отметим, что в данной заметке посредством групповых методов Ли найдено фундаментальное решение уравнения диффузии пробных частиц в пространственно-неоднородном течении жидкости, профиль скорости которого в направлении, перпендикулярном течению, изменяется по линейному закону. Построено решение задачи Коши для адвективно-диффузионного уравнения как без

источника, так и с произвольным источником в правой части уравнения. В качестве иллюстрации найдены законы временной эволюции сгустка пробных частиц с гауссовым распределением и периодической решетки пробных частиц.

Работа поддержана фондом “Научный потенциал” (НСФ, грант # 101) и Российским фондом фундаментальных исследований (проект # 07-02-00441). Автор выражает признательность В.И. Ильгисонису за пло-

дотворные обсуждения работы и помощь в подготовке рисунка и К.В. Чукбару за полезные замечания, способствовавшие улучшению текста статьи.

-
1. G. W. Bluman and S. Kumei, *Symmetries and Differential Equations*, Springer-Verlag, New York, 1989.
 2. G. I. Taylor, Proc. R. Soc. London A **219**, 186 (1953).
 3. G. I. Taylor, Proc. R. Soc. London A **225**, 473 (1954).