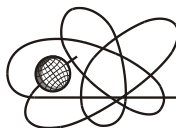




Российская Академия Наук

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

**ИНСТИТУТ ПРОБЛЕМ
БЕЗОПАСНОГО РАЗВИТИЯ
АТОМНОЙ ЭНЕРГЕТИКИ**



ИБРАЭ

RUSSIAN ACADEMY OF SCIENCES

**NUCLEAR SAFETY
INSTITUTE**

Препринт ИБРАЭ № ИБРАЭ-2001-11

Preprint IBRAE-2001-11

А.М. Дыхне, И.Л. Драников, П.С. Кондратенко, А.В. Попов

АНОМАЛЬНАЯ ДИФфуЗИЯ В РЕГУЛЯРНО- НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

Москва
2001

Moscow
2001

Дыхне А.М., Драников И.Л., Кондратенко П.С., Попов А.В. АНОМАЛЬНАЯ ДИФФУЗИЯ В РЕГУЛЯРНО-НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ. Препринт № ИВРАЕ-2001-11. Москва: Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2001. 8 с. — Библиогр.: 1 назв.

Аннотация

Проанализирован процесс миграции примесей в однородной среде I , ограниченной в одном направлении ($\rho = 2$, плоскопараллельный слой) или в двух ($\rho = 1$, прямой цилиндр) и окруженной другой средой II , занимающей остальную часть пространства. Обе среды являются упорядоченными. Коэффициент диффузии в среде I существенно больше, чем в среде II , $D \gg d$. Установлено, что в интервале времени $t_1 \ll t \ll t_2$ (где $t_1 = \frac{a^2}{4D}$, a – характерный размер по направлениям ограничения области I ; $t_2 = \left(\frac{D}{d}\right)^2 t_1$ при $\rho = 2$ и $t_2 = \left(\frac{D}{d}\right) \ln\left(\frac{D}{d}\right) t_1$ при $\rho = 1$) миграция примесей характеризуется субдиффузионным поведением с дисперсией $\sim D\sqrt{tt_1}$ для $\rho = 2$ и $\sim Dt_1 \ln\left(\frac{t}{t_1}\right)$ для $\rho = 1$. На временах $t \ll t_1$ и $t \gg t_2$ имеет место классическая диффузия с коэффициентами D и d соответственно. Полученные результаты могут быть полезными в разработке методов оценок надежности захоронений радиоактивных отходов в скальных породах.

©ИБРАЭ РАН, 2001

Dykhne A.M., Dranikov I.L., Kondratenko P.S., Popov A.V. ANOMALOUS DIFFUSION IN REGULARLY NON-UNIFORM MEDIA (in Russian). Preprint IBRAE-2001-11. Moscow: Nuclear Safety Institute RAS, 2001. 8 p. — Refs.: 1 items.

Abstract

Contaminant transport in homogeneous medium I, restricted in one direction ($\rho = 2$, plane-parallel layer) or in two directions ($\rho = 1$, straight cylinder) and surrounded by another medium II filling the rest of the space has been analyzed. Both media are regular. Diffusivity of the medium I is significantly greater than that for the medium II, $D \gg d$. It has been found that in the time range of $t_1 \ll t \ll t_2$ (where $t_1 = \frac{a^2}{4D}$, a is characteristic dimension along the restriction directions of the medium I; $t_2 = \left(\frac{D}{d}\right)^2 t_1$ at $\rho = 2$ and $t_2 = \left(\frac{D}{d}\right) \ln\left(\frac{D}{d}\right) t_1$ at $\rho = 1$) the contaminant transport is of subdiffusion behavior with the dispersion $\sim D\sqrt{tt_1}$ for $\rho = 2$ and $\sim Dt_1 \ln\left(\frac{t}{t_1}\right)$ for $\rho = 1$. Classical diffusion at the times $t \ll t_1$ and $t \gg t_2$ with diffusivities of D and d , respectively, takes place. The results obtained may be helpful for the development of methods to assess reliability of radioactive waste storage in rock massifs.

©Nuclear Safety Institute, 2001

Аномальная диффузия в регулярно-неоднородных средах

А.М. Дыхне, И.Л. Драников, П.С. Кондратенко, А.В. Попов

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН

113191 Москва, Большая Тульская 52

Тел.: (095) 955 2291

Факс: (095) 958 0040

Э-почта: kondrat@ibrae.ac.ru

1. Введение

На протяжении последних десятилетий изучение процессов переноса в неупорядоченных средах переживает период бурного развития (см., напр., [1] и имеющиеся там ссылки). Во многом причиной служит то обстоятельство, что для большинства рассматриваемых систем характерны аномальные зависимости дисперсии мигрантов от времени, для которых степенные асимптотики имеют отличный от единицы показатель. Такие системы не могут описываться обычным уравнением переноса с регулярной и кусочно-дифференцируемой зависимостью параметров от координат, иначе говоря, они имеют стохастическую или фрактальную структуру.

В настоящей работе мы проанализируем пример очень простой системы, состоящей из двух областей с постоянными параметрами в каждой из двух составляющих ее областей, которая в чрезвычайно широком интервале времен, охватывающем много порядков, проявляет аномальные диффузионные свойства.

Постановка задачи такова. Рассматривается классическая диффузия* в среде, занимающей область I , которая ограничена в одном или в двух измерениях и отвечает соответственно плоскопараллельному слою толщиной a или прямому цилиндру (не обязательно круглому) с тем же значением характерного диаметра. Вторая область II , занятая окружающей средой, занимает всю остальную часть пространства. Будем считать, что коэффициент диффузии в первой области, D , существенно превосходит его значение во второй области d :

$$D \gg d \quad (1)$$

Диффундирующие частицы (примеси) в начальный момент времени сосредоточены в области I , занимая конечный участок размером $\sim a$. Наша цель будет состоять в нахождении временной зависимости дисперсии† примесей $\langle \bar{r}_t^2 \rangle$, которая определена соотношением

$$\langle \bar{r}_t^2 \rangle = \frac{\int_{(I)} d\bar{r} \bar{r}_t^2 n(\bar{r}, t)}{\int_{(I)} d\bar{r} n(\bar{r}, t)} \quad (2)$$

Здесь $n(\bar{r}, t)$ – зависящая от пространственных координат и времени концентрация примесей. \bar{r}_t – радиус-вектор, касательный к границе раздела двух сред. Он имеет размерность $\rho = 2$, если область I соответствует плоскопараллельному слою, и $\rho = 1$ в случае прямого цилиндра.

* В роли диффузии не обязательно выступает молекулярная диффузия. Это может быть и конвекция, и в этом случае более употребительным термином является “дисперсия”.

† В данном случае дисперсия понимается не как эффективная диффузия, а как характеристика пространственного распределения концентрации примесей.

Статья построена следующим образом. Во втором разделе основные результаты будут получены на качественном уровне. Решение задачи будет найдено в третьем разделе. Обсуждению результатов посвящен заключительный раздел.

2. Качественный анализ

На временах $t \ll t_0$, где $t_0 = a^2 / 4D$ – время диффузии в среде I на расстояние порядка ее поперечных размеров, диффузия примесей не выходит за пределы этой среды и происходит так, как если бы она занимала все пространство. На временах $t \gg t_0$ распределение примесей в среде I становится однородным по одному (для плоскопараллельного слоя) или двум (для цилиндра) направлениям, по которым данная среда является ограниченной. Если при этом длина диффузии в окружающей среде мала в сравнении с поперечным размером среды I , то есть

$$t \ll t_1, \quad t_1 = a^2 / 4d \quad (3)$$

то большую часть времени частицы примеси проводят внутри первой среды, и тогда мы имеем дело с квазидвумерной при $\rho = 2$ или квазиодномерной при $\rho = 1$ диффузией. Дисперсия примесей при этом дается известным выражением

$$\langle \vec{r}_t^2 \rangle = 2\rho Dt \quad t_0 \ll t \ll t_1 \quad (4)$$

Ситуация меняется на временах $t \gg t_1$, когда доля времени τ , проводимая частицей примеси в течение интервала t в среде I , становится много меньше единицы. Величина τ дается по порядку величины отношением объемов, занятых частицами в средах I и II :

$$\tau \sim \left(\frac{a}{\sqrt{dt}} \right)^{3-\rho} \quad (5)$$

Дисперсию частиц в среде I оценим по формуле

$$\langle \vec{r}_t^2 \rangle \sim D \int_{t_1}^t \tau(t') dt' \quad (6)$$

Подставляя (5) в (6), находим оценки

$$\langle \vec{r}_t^2 \rangle \sim \frac{Da}{\sqrt{d}} t^{1/2} \quad \rho = 2 \text{ (область } I \text{ – плоскопараллельный слой)} \quad (7)$$

$$\langle \vec{r}_t^2 \rangle \sim \frac{Da^2}{d} \ln \left(\frac{t}{t_1} \right) \quad \rho = 1 \text{ (область } I \text{ – прямой цилиндр)} \quad (8)$$

Соотношения (7), (8) остаются справедливыми, пока выполняется неравенство $dt \ll \langle \vec{r}_t^2 \rangle$. С ростом времени данный режим дисперсии прекращается при $t \sim t_2$, когда дисперсия примесей внутри среды II по нормали к границе сред $\sim dt$ сравнивается с величиной $\langle \vec{r}_t^2 \rangle$. С учетом (7), (8) находим оценку для t_2 :

$$t_2 \sim \left(\frac{D}{d} \right)^2 t_1 \quad \rho = 2 \quad (9)$$

$$t_2 \sim \frac{D}{d} t_1 \ln\left(\frac{D}{d}\right) \quad \rho = 1 \quad (10)$$

На временах $t \gg t_2$ дисперсия $\langle \vec{r}_t^2 \rangle$ определяется законами диффузии в среде II , и мы получаем

$$\langle \vec{r}_t^2 \rangle \sim 2p dt \quad (11)$$

3. Задача о диффузии

Эволюция концентрации примеси во времени определяется обычным уравнением диффузии, которое в среде I имеет вид

$$\frac{\partial n}{\partial t} = D \Delta n \quad (12)$$

а в среде II получается из (12) путем замены $D \rightarrow d$. На временах $t \gg t_0$, когда дисперсия в области I много больше размера поперечного сечения этой области, a , и распределение примесей по этому сечению в ней становится однородным, уравнение (12) удобно проинтегрировать по площади сечения и перейти в представление Фурье по координате \vec{r}_t и Лапласа по времени. После этого оно принимает форму

$$(s + D\vec{k}^2) N_{\vec{k},s} + q_{\vec{k},s} = M \quad (13)$$

Здесь использованы обозначения:

$$N_{\vec{k},s} = n_{\vec{k},s} S \quad (14)$$

$$n_{\vec{k},s} = \int_0^\infty dt \int d^{(p)}\vec{r}_t e^{-st - i\vec{k}\vec{r}_t} n(\vec{r}_t, t) \quad (15)$$

$q_{\vec{k},s}$ – фурье-лаплас-компонента плотности потока частиц примеси через границу сред из области I в II , S – площадь поперечного сечения при $\rho = 1$ и $S = a$ при $\rho = 2$. M – полное количество частиц примеси в начальный момент времени

$$M = \int d\vec{r} n(\vec{r}, 0) \quad (16)$$

Для того чтобы замкнуть задачу о среде I , необходимо установить связь между величинами $q_{\vec{k},s}$ и $N_{\vec{k},s}$. С этой целью воспользуемся уравнением диффузии в области II , учтя условия непрерывности концентрации и потока частиц на границе двух сред. Отдельно рассмотрим случаи $\rho = 2$ и $\rho = 1$.

Стандартное решение задачи диффузии в полубесконечном пространстве с заданным потоком на плоской границе приводит к соотношению:

$$n_{s,\vec{k}} = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\kappa}{2\pi} \frac{q_{s,\vec{k}}}{s + d(\vec{k}^2 + \kappa^2)} = \frac{q_{s,\vec{k}}}{2\sqrt{d(s + d\vec{k}^2)}} \quad \rho = 2 \quad (17)$$

Выражая с помощью (14), (17) $q_{\vec{k},s}$ через $N_{\vec{k},s}$ из уравнения (13) находим выражение для $N_{\vec{k},s}$:

$$N_{s,\vec{k}} = \frac{M}{s + D\vec{k}^2 + \sqrt{\frac{s + d\vec{k}^2}{t_1}}} \quad \rho = 2 \quad (18)$$

Отметим, что это уравнение пригодно для описания эволюции концентрации примесей для всех времен, удовлетворяющих условию $t \gg t_0$.

При выводе уравнения типа (18) для области I , имеющей форму прямого цилиндра ($\rho = 1$), потребуем выполнения более жесткого неравенства – $t \gg t_1$. В этом случае связь между $n_{k,s}$ и $q_{k,s}$ удастся установить в общем виде для произвольной формы поперечного сечения цилиндра:

$$n_{k,s} = \frac{q_{k,s}}{2\pi d} \ln \left(\frac{F}{st_1 + \left(\frac{ka}{2}\right)^2} \right) \quad \rho = 1 \quad (19)$$

Константа $F \sim 1$ зависит от формы сечения цилиндра, при этом $a = \sqrt{\frac{4S}{\pi}}$. Для круглого цилиндра

$F = 2e^{-C}$, где $C \cong 0.577$ – постоянная Эйлера.

С учетом (19) и (14) решение уравнения (13) применительно к описанию диффузии на временах $t \gg t_1$ при $\rho = 1$ приобретает форму:

$$N_{k,s} = M \frac{t_1}{2} \ln \left(\frac{F}{st_1 + \left(\frac{ka}{2}\right)^2} \right) \quad \rho = 1 \quad (20)$$

Перейдем теперь к вычислению дисперсии, определенной соотношением (2). Учитывая однородность распределения концентрации по сечению области I на временах $t \gg t_1$ и формулу для обратного фурье-лаплас преобразования

$$N(\vec{r}, t) = M \int_c \frac{ds}{2\pi i} \int \frac{d^{(\rho)}\vec{k}}{(2\pi)^\rho} \exp(st + i\vec{k}\vec{r}) N_{\vec{k}s} \quad (21)$$

(знак C при интеграле обозначает контур Меллина), получим следующее соотношение:

$$\langle \vec{r}_t^2 \rangle = \frac{- \int_c \frac{ds}{2\pi i} e^{ist} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial k_\alpha^2} N_{\vec{k}s} \right\} \Big|_{\vec{k}=0}}{\int_c \frac{ds}{2\pi i} e^{ist} N_{0s}} \quad (22)$$

Здесь происходит суммирование по целочисленным значениям индекса α от 1 до ρ . Подставляя выражения (18), (20) в формулу (22), получим для дисперсии примеси на временах $t \gg t_1$ выражения:

$$\langle \bar{r}_t^2 \rangle = 4 \left(D \sqrt{\pi t t_1} + dt \right) \quad \rho = 2 \quad (23)$$

$$\langle \bar{r}_t^2 \rangle = 2Dt_1 \ln \left(F \frac{t}{t_1} \right) + 2dt \quad \rho = 1 \quad (24)$$

4. Заключение

Основные результаты работы состоят в следующем.

Процессы миграции примесей в системе, отвечающей среде с коэффициентом диффузии D , занимающей область, ограниченную по одному (плоскопараллельный слой) или по двум (прямой цилиндр) направлениям, и окруженной бесконечной средой с коэффициентом диффузии $d \ll D$, в зависимости от времени описываются принципиально различными закономерностями. На очень малых ($t \ll t_1$) и очень больших ($t \gg t_2$) временах происходит классическая диффузия с большим D и малым d коэффициентами диффузии, соответственно. В промежуточной области ($t_1 \ll t \ll t_2$) имеет место аномальный режим диффузии (субдиффузия), отвечающий корневой зависимости дисперсии от времени для плоскопараллельного слоя и логарифмическому плато для прямого цилиндра. Следует особо отметить, что при больших D/d (например, 10^7) границы этой области могут быть разнесены на много порядков, и t_2 может оказаться практически недостижимо. В этом случае, подобно случаю нерегулярных сред, аномальный режим будет выступать в роли асимптотического.

Представляется естественным подобрать интерполяционные формулы, соответствующие (4) при $t \ll t_1$ и (23-24) при $t \gg t_1$. Легко видеть, что этим условиям удовлетворяют

$$\langle \bar{r}_t^2 \rangle = 2\pi D t_1 \left(\sqrt{1 + \frac{4t}{\pi t_1}} - 1 \right) + 4dt \quad \rho = 2 \quad (25)$$

$$\langle \bar{r}_t^2 \rangle = 2Dt_1 \ln \left(1 + \frac{t}{t_1} \right) + 2dt \quad \rho = 1 \quad (26)$$

Поведение дисперсии, описываемое формулами (25) и (26), изображено на Рис. 1.

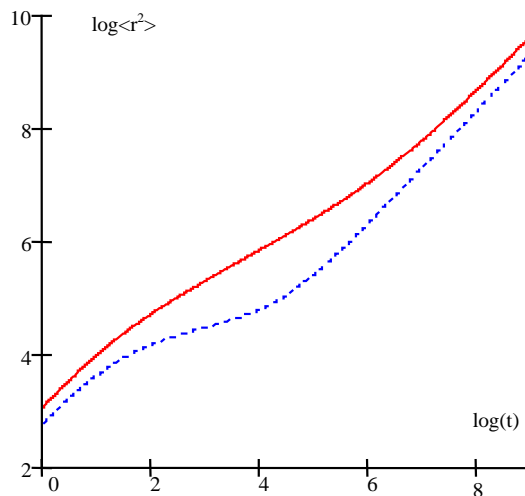


Рис. 1

Log-log зависимость дисперсии от времени при $\rho=1$ (пунктирная линия) и при $\rho=2$ (сплошная линия); $\log t_1=1$, $D/d=300$.

Картина смены режимов диффузии может оказаться еще более сложной, если область l имеет вид, например, прямого цилиндра прямоугольного сечения со сторонами a и b , такими что $a^2/D \gg b^2/d$. В нем будут иметь место:

1. обычная диффузия с коэффициентом D при $t \ll \frac{b^2}{d}$
2. корневая зависимость дисперсии при $\frac{b^2}{d} \ll t \ll \frac{a^2}{D}$
3. логарифмическая при $\frac{a^2}{d} \ll t \ll \frac{D}{d} \frac{a^2}{d} \ln\left(\frac{D}{d}\right)$
4. обычная диффузия с коэффициентом d при $t \gg \frac{D}{d} \frac{a^2}{d} \ln\left(\frac{D}{d}\right)$.

Решенная здесь задача о диффузии начального возмущения в ограниченной по одному или двум направлениям области l , которой может быть, например, трещина в скальных породах, представляет особый интерес в связи с проблемами захоронения радиоактивных отходов. Экспериментальные измерения распространяющихся из хранилищ “хвостов” на порядки расходятся с теоретическими оценками, основанными на обычных диффузионных асимптотиках. Трещиноватая скальная порода есть наиболее типичное место таких хранилищ. Поэтому изучение диффузионного поведения частиц в ее “элементарной ячейке” – единичной трещине, окруженной слабопроницаемой средой, – важно для понимания процессов, приводящих к указанному расхождению, и разработки методов оценки надежности захоронений. Полученные результаты могут оказаться полезными для этих целей.

В заключение авторы выражают глубокую благодарность С.А. Рыбаку за интересные и плодотворные дискуссии.

Литература

1. 1. Isichenko M.B., Percolation, statistical topography, and transport in random media, Reviews of modern physics, 1992, v. 64, No. 4