

Аномальный перенос примеси в сильнонеоднородных средах применительно к проблеме захоронения радиоактивных отходов

Л. А. Большов, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев

1. Введение

Обширный массив данных наблюдений, накопленный в последние десятилетия, свидетельствует, что процессы переноса примеси в сильнонеоднородных средах далеко не всегда описываются классическими закономерностями, при этом расхождение может составлять многие порядки. Аномальные процессы переноса встречаются в полупроводниках, плазме, космосе и других средах [1—3]. С точки зрения практических приложений особое место в этом ряду занимают геологические среды.

Как известно, перспективы развития атомной энергетики во многом связаны с решением проблемы радиоактивных отходов. Применительно к долгоживущим радионуклидам эту проблему предполагается решать путем захоронения в слабопроницаемых геологических формациях [5]. Ожидается, что в среднесрочной перспективе (на сотни и, возможно, тысячи лет) надежность захоронений будет обеспечена созданием инженерных защитных сооружений. Состояние же их в долгосрочной перспективе (на сотни тысяч лет и более) зависит от эффективности естественных геологических барьеров. Отсюда вытекает исключительная важность задач о переносе примесей в сильно неупорядоченных средах, каковыми являются геологические структуры.

С точки зрения теоретических подходов исследования аномальной диффузии можно условно разделить на два типа. Работы первого типа базируются на сугубо математических постановках задач без привязки к физическим механизмам переноса примеси. К ним относятся модель «Continuous time random walks» (CTRW) [2; 6; 7], исходящая из распределения вероятностей времени ожидания между двумя последовательными прыжками частицы примеси, а также модель дробной диффузии [8—11], основанная на уравнениях с дробными производными. В рамках таких подходов был достигнут ряд интересных результатов, однако некоторые из них, будучи получены в отрыве от физической картины процессов, например степенные асимптотики концентрации примеси на далеких расстояниях, в на-

стоящее время представляются спорными. Подходы второго типа связаны с решением задач о переносе примеси в реальных средах на основе конкретных физических механизмов. Примерами могут служить исследования [12—16].

В настоящей работе представлен ряд физических моделей аномального переноса примеси, отражающих существенные особенности структуры геологических сред. Прежде чем перейти к изложению самих моделей, проведем качественное рассмотрение механизмов аномальных режимов переноса примеси в геологических средах.

Анализ результатов полевых наблюдений [17] (см. также [18—30]) привел к заключению, что один из главных факторов, определяющих просачивание влаги и перенос примеси в геологических средах, — сложная неоднородная структура естественных сеток трещин, которые, как показывают наблюдения, проявляют фрактальные свойства [31] и подпадают под определение перколяционных сред [32; 33]. Характеристики таких сред определяются свойствами связности их структурных элементов (в случае геологических сред ими являются трещины, частично или полностью заполненные влагой). Такие элементы объединяются в кластеры, внутри которых протекание влаги и перенос примеси являются эффективными, в то время как между различными кластерами эти процессы сильно затруднены. Из наиболее существенных характерных особенностей перколяционных сред выделим две [17].

Первая состоит в наличии перколяционного порога. В состоянии ниже порога существуют только конечные кластеры и стационарные процессы протекания влаги в бесконечной среде происходить не могут. В среде, находящейся выше порога перколяции, имеется бесконечный кластер, тогда ограничение на пространственный масштаб для процессов протекания влаги переноса примеси исчезает и такое протекание в бесконечной среде возможно.

Вторая особенность перколяционных сред — корреляционная длина ξ .

Ниже перколяционного порога размеры кластеров l сосредоточены в интервале $l < \xi$ (концентрация кластеров с размерами $l \gg \xi$ экспоненциально мала). В этом случае отдельный кластер в интервале масштабов от некоторого нижнего граничного значения a до его размера l обладает фрактальными свойствами [31]. Это, в свою очередь, означает, что кластер как геометрический объект имеет не целую, а дробную пространственную размерность. При стремлении к перколяционному порогу корреляционная длина стремится к бесконечности, и при достижении порога в среде возникает бесконечный кластер. Выше перколяционного порога параметр ξ

снова становится конечным. Здесь среда оказывается фрактальной на масштабах $a < l < \xi$, а при $l \gg \xi$ делается статистически однородной.

В интервале длин $a \ll r \ll \xi$ отсутствует пространственный масштаб, характеризующий поведение системы трещин. Такое положение дает возможность при описании процессов инфильтрации влаги и переноса примеси воспользоваться представлениями теории критических явлений [34; 35], считая указанные процессы в интервале длин $a \ll r \ll \xi$ масштабно инвариантными. Другими словами, макроскопические уравнения переноса можно считать инвариантными по отношению к пространственным преобразованиям:

$$\vec{r} \rightarrow s\vec{r}, \quad (1.1)$$

где \vec{r} — пространственный вектор.

При этом величины, характеризующие процессы переноса (такие как скорость просачивания, плотность потока примеси, концентрация и т. д.), преобразуются согласно соотношению

$$B \rightarrow s^{-\Delta_B} B, \quad (1.2)$$

в котором показатель Δ_B называется масштабной размерностью величины B . Некоторые соотношения между масштабными размерностями получаются из законов сохранения и макроскопических уравнений. В то же время определение всех размерностей требует более глубокого анализа.

Сам факт наличия масштабных размерностей существенно упрощает установление закономерностей, связывающих характеристики процессов протекания и переноса. При этом функциональные зависимости от одной переменной оказываются степенными функциями, а от двух и более переменных сводятся к произведению степенной функции на безразмерную функцию от одной или более автомодельных переменных, которые являются масштабно инвариантными комбинациями исходных переменных. Примером закономерностей первого типа является зависимость размера основной области локализации примеси (в дальнейшем — облака примеси) от времени

$$R(t) \propto t^\gamma. \quad (1.3)$$

При $\gamma = 1/2$ мы имеем дело с классической диффузией, которая реализуется в статистически однородных системах при $R(t) \gg \xi$. Аномальные

режимы переноса с $\gamma > 1/2$ (супердиффузия) и $\gamma < 1/2$ (субдиффузия) могут иметь место во фрактальных средах при $R(t) \ll \xi$.

Основным механизмом переноса примеси в трещиноватых скальных породах является адвекция, обусловленная просачиванием влаги. Перколяционные системы трещин сильно неупорядочены. Поэтому адвекционный перенос по системе трещин носит случайный характер. Вследствие фрактальной природы перколяционных кластеров корреляции скорости адвекции являются дальнедействующими и на больших расстояниях убывают по степенным законам. В силу этого обстоятельства и благодаря тому, что адвекция является самым быстрым механизмом переноса, возникают предпосылки для супердиффузионного режима переноса примеси, которому отвечает значение $\gamma > 1/2$ в (1.3). Анализ закономерностей переноса примеси в модели случайной адвекции составляет содержание разделов 1 и 2.

Другой существенный для формирования механизмов переноса примеси аспект возникает из свойства резкого контраста в распределении характеристик геологической среды, вызванного присутствием слабопроницаемой матрицы. Для переноса по трещинам, содержащим влагу, матрица играет роль ловушки, приводящей к замедлению процессов переноса. Вместе с тем сам перколяционный кластер имеет сложную топологическую структуру. Он состоит из остова («backbone» в англоязычной литературе) и системы мертвых концов («dead ends»). Остов соединяет удаленные части кластера. В то же время каждый из мертвых концов соединен с остовом только в одной точке. При этом мертвые концы остаются изолированными как друг от друга, так и от других участков остова. Это означает, что по отношению к процессам просачивания влаги и переноса примеси мертвые концы, так же как и матрица, играют роль ловушек или стоков. Важно заметить, что фрактальная размерность системы мертвых концов, а также матрицы больше, чем остова перколяционного кластера. Таким образом, мертвые концы вместе с матрицей можно рассматривать как слабопроницаемую подсистему трещиноватой геологической среды по сравнению с остовом кластера трещин, представляющего собой сильнопроницаемую подсистему.

Ввиду наличия двух контрастирующих подсистем (сильно- и слабопроницаемых) все частицы примеси можно разделить на две группы: активные частицы, находящиеся в сильнопроницаемой подсистеме, и пассивные частицы, относящиеся к слабопроницаемой подсистеме. Наибольший интерес представляют активные частицы ввиду их высокой подвижности. Присутствие слабопроницаемой подсистемы приводит к двум следствиям. Первое — полное число активных частиц убывает со временем в связи с

тем, что некоторые из них уходят в ловушки. Второе следствие состоит в замедлении процесса переноса примеси, приводящем к режиму субдиффузии с $\gamma < 1/2$ в (1.3). Переносу примеси в резко контрастных средах посвящены разделы 4 и 5.

Приведенные соображения позволяют записать концентрацию активных частиц следующим образом:

$$c(\vec{r}, t) = \frac{N(t)}{R^3(t)} \Phi(\zeta), \quad \zeta = \frac{r}{R(t)}, \quad (1.4)$$

где $N(t)$ — полное число активных частиц; $R(t)$ — размер облака примеси в зависимости от времени; ζ — автомодельная переменная. Вид зависимостей $R(t)$ и $N(t)$ определяет режим переноса примеси. С течением времени режимы переноса могут сменять друг друга вследствие включения или отключения отдельных элементов механизма переноса (например, ловушек). Поэтому форма функций, присутствующих в соотношении (1.4), является спецификой интервала времени, определяемого действием соответствующего этому интервалу режима переноса.

Важнейшей характеристикой распределения концентрации примеси, особенно для проблемы захоронения радиоактивных отходов, является асимптотическое поведение концентрации на далеких расстояниях (при $\xi \gg 1$ в (1.4)) — концентрационные хвосты. Для практики исключительно значимо, являются хвосты степенными или экспоненциальными, поскольку различие в концентрации между этими двумя видами асимптотик может составлять многие порядки величины. Структура асимптотик концентрации проанализирована для каждой из рассмотренных ниже моделей.

2. Супердиффузия в модели случайной адвекции

Случайная адвекция в поле скоростей с дальнедействующими корреляциями является простейшим физическим механизмом, который способен привести к супердиффузионному режиму переноса. В настоящем разделе в рамках этой модели проанализировано поведение концентрации примеси во всем диапазоне изменения координат и времени. Особое внимание уделено структуре асимптотик концентрации на больших расстояниях. В качестве метода исследования используется анализ масштабных размерностей.

Отметим, что доминирующим механизмом переноса примеси в скальных породах является адвекция за счет фильтрации влаги по трещинам. Поскольку геометрия трещин является фрактальной, возникают предпосылки для далекодействующих корреляций характеристик среды. Поэтому представленная здесь модель отражает один из ключевых моментов, определяющих перенос примесей в геологических средах.

Структура раздела такова. В подразделе 2.1 формулируется задача. Подраздел 2.2 посвящен выводу основных соотношений, вытекающих из анализа группы масштабных преобразований. В подразделе 2.3 выясняются общие закономерности поведения концентрации в зависимости от координат и времени при различных законах, определяющих убывание пространственных корреляций скорости адвекции. Подраздел 2.4 посвящен исследованию асимптотических зависимостей концентрации на больших расстояниях от источника.

2.1. Формулировка задачи

Основу модели составляет уравнение для концентрации примеси $c(\vec{r}, t)$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\vec{v}c) = 0, \quad (2.1)$$

где $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r})$ — скорость адвекции. Величина $\vec{v}(\vec{r})$ является случайной функцией координат, причем среднее значение по ансамблю реализаций $\langle \vec{v}(\vec{r}) \rangle = 0$.

Поле скоростей удовлетворяет уравнению несжимаемости

$$\text{div } \vec{v}(\vec{r}) = 0. \quad (2.2)$$

Мы полагаем, что корреляции флуктуаций скорости на больших расстояниях убывают по степенным законам. В частности, парный коррелятор

$$K_{ij}^{(2)}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \langle v_i(\vec{r}_1) v_j(\vec{r}_2) \rangle \quad (2.3)$$

обладает следующими свойствами:

$$K_{ij}^{(2)}(\vec{r}) \propto \begin{cases} V^2 \left(\frac{a}{r}\right)^{2h} & \text{при } r \gg a, \\ V^2 & \text{при } r \leq a, \end{cases} \quad (2.4)$$

где $h > 0$; a — параметр длины, имеющий смысл нижней границы фрактального интервала; V — параметр, имеющий размерность скорости. Таким образом, при $r \gg a$ величина $K_{ij}^{(2)}(\vec{r})$ является однородной функцией своего аргумента порядка $-2h$. Аналогично n -точечный коррелятор скоростей, определенный формулой

$$K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \langle v_{i_1}(\vec{r}_1) v_{i_2}(\vec{r}_2) \dots v_{i_n}(\vec{r}_n) \rangle, \quad (2.5)$$

в области $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \gg a$ (для всех пар переменных \vec{r}_i, \vec{r}_j) удовлетворяет соотношению

$$K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\lambda \vec{r}_1, \lambda \vec{r}_2, \dots, \lambda \vec{r}_n) = \lambda^{-nh} K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n). \quad (2.6)$$

В соответствии с (2.6) для Фурье-образа n -точечного коррелятора

$$\begin{aligned} & K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}\{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_n\} = \\ & = \int d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 \dots d^3 \vec{r}_n \exp\left[-i(\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \vec{r}_2 + \dots + \vec{k}_n \vec{r}_n)\right] K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \\ & = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \dots + \vec{k}_n) \tilde{K}_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}\{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_{n-1}\} \end{aligned} \quad (2.7)$$

справедливо масштабное соотношение

$$K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}\{\lambda \vec{k}_1, \lambda \vec{k}_2, \dots, \lambda \vec{k}_n\} = \lambda^{n(h-3)} K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}\{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_n\}. \quad (2.8)$$

Из равенств (2.4) и (2.8) вытекает, что в области малых волновых векторов ($ka \ll 1$, $k \equiv |\vec{k}|$) Фурье-образ парного коррелятора имеет вид

$$\tilde{K}_{ij}^{(2)}\{\vec{k}\} \sim V^2 a^{2h} k^{2h-3}. \quad (2.9)$$

Аналогичным образом при малых волновых векторах ведут себя и корреляционные функции более высоких порядков. В области больших волновых векторов ($ka > 1$) с ростом k корреляционные функции быстро убывают.

2.2. Масштабный анализ

Макроскопическое уравнение переноса. Практический интерес представляет распределение концентрации, осредненное по ансамблю реализаций среды, $\bar{c}(\vec{r}, t) = \langle c(\vec{r}, t) \rangle$. Для него справедливо стандартное макроскопическое уравнение

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \operatorname{div} \bar{q} = 0. \quad (2.10)$$

Здесь $\bar{q}(\vec{r}, t)$ — усредненная плотность потока частиц, удовлетворяющая очевидному требованию обращаться в нуль при однородном распределении концентрации. С учетом линейности задачи и принципа причинности имеем

$$q_i(\vec{r}, t) = - \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{r}' f_{ij}(\vec{r}', t') \frac{\partial \bar{c}(\vec{r} - \vec{r}', t - t')}{\partial r_j}. \quad (2.11)$$

Здесь и далее будем рассматривать задачу с начальным условием $\bar{c}(\vec{r}, 0) = c^{(0)}(\vec{r})$ в отсутствие источника, так что средняя концентрация и ее начальное значение связаны соотношением

$$\bar{c}(\vec{r}, t) = \int d^3 \vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}', t) c^{(0)}(\vec{r}'). \quad (2.12)$$

Функция Грина $G(\vec{r}, t)$ в представлении Фурье—Лапласа

$$G\{\vec{k}, p\} = \int_0^{\infty} dt \int d^3 \vec{r} e^{-pt - i\vec{k}\vec{r}} G(\vec{r}, t) \quad (2.13)$$

в соответствии с (2.10) и (2.11) дается выражением

$$G\{\vec{k}, p\} = \left[p - M(\vec{k}, p) \right]^{-1}, \quad (2.14)$$

где

$$M(k, p) = -k_i k_j \int_0^{\infty} dt e^{-pt} \int d^3 \vec{r} e^{-i\vec{k}\vec{r}} f_{ij}(\vec{r}, t). \quad (2.15)$$

Решения уравнения переноса, получающегося подстановкой (2.11) в (2.10), обязаны удовлетворять очевидному физическому требованию — быть устойчивыми. Условие, необходимое для этого, состоит в отсутствии полюсов функции Грина $G\{\vec{k}, p\}$ при действительных значениях волнового вектора и действительных положительных значениях переменной Лапласа:

$$G^{-1}\{\vec{k}, p\} \neq 0 \text{ при } \operatorname{Im}\{\vec{k}, p\} = 0, p > 0. \quad (2.16)$$

Масштабные размерности. В принятой модели (см. (2.4)) не существует пространственного масштаба, характеризующего поведение системы при $r \gg a$. Это обстоятельство позволяет использовать идеи теории критических явлений [19; 20] и потребовать масштабной инвариантности макроскопического уравнения переноса на расстояниях $r \gg a$. Иными словами, это уравнение должно переходить само в себя при масштабном преобразовании

$$\vec{r} \rightarrow \lambda \vec{r}.$$

При этом величины, входящие в (2.10) и (2.11), преобразуются согласно

$$A \rightarrow \lambda^{-\Delta_A} A, \quad (2.17)$$

где показатель Δ_A называется масштабной размерностью величины A .

Из (2.4) и свойства сохранения полного числа частиц вытекают значения масштабных размерностей скорости, концентрации и функции Грина:

$$\Delta_v = h, \quad \Delta_c = \Delta_G = 3. \quad (2.18)$$

(2.10) вместе с (2.11) позволяют связать масштабные размерности времени и плотности потока:

$$\Delta_t = 2 - \Delta_q. \quad (2.19)$$

Размерности плотности потока и времени находим из тождества $\vec{q} = \langle \vec{v}c \rangle$ с учетом (2.18) и (2.19):

$$\Delta_q = h + 3, \quad (2.20)$$

$$\Delta_t = -(1 + h). \quad (2.21)$$

Из равенств (2.11), (2.20) и (2.21) находим масштабную размерность функции $f_{ij}(\vec{r}, t)$:

$$\Delta_f = 2h + 3. \quad (2.22)$$

Отметим, что результаты этого подраздела справедливы при условии, что свойства переноса определяются дальнедействующей ($r \gg a$) частью корреляций скорости (см. ниже).

2.3. Общие закономерности поведения концентрации

С учетом равенств (2.21) и (2.22) функцию $f_{ij}(\vec{r}, t)$ можно представить в виде

$$f_{ij}(\vec{r}, t) = \frac{(Va^h)^2}{r^{2h+3}} \chi_{ij} \left(\vec{n}, \frac{r}{(Va^h t)^{1/(1+h)}} \right) \text{ при } r \gg a, \quad (2.23)$$

$$f_{ij}(\vec{r}, t) \sim \frac{V^2}{a^3} \text{ при } r \leq a. \quad (2.24)$$

Величина χ_{ij} , входящая в (2.23), является безразмерной тензорной функцией, а $\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$.

Обратимся теперь к свойствам функции Грина (и соответственно к поведению концентрации) в зависимости от значения h . Отдельно рассмотрим случаи $h > 1$, $h < 1$ и $h = 1$.

1. $h > 1$. Как видно из (2.23) и (2.24), при $h > 1$ основной вклад в интеграл (2.15) дает область $r \sim a$, $t \sim a/V$. При этом функция $f_{ij}(\vec{r}, t)$ определяется оценкой (2.24). Поскольку нас интересует крупномасштабное распределение концентрации ($r \gg a$, $t \gg a/V$), в подынтегральном выражении (2.15) мы можем положить $\exp(-ikr - pt) \cong 1$. Таким образом, для $h > 1$ получаем

$$M = -Dk^2, \quad D \sim Va \text{ при } h > 1. \quad (2.25)$$

Переход отсюда с учетом (2.13), (2.14) в координатно-временное представление приводит к классическому уравнению диффузии

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} - D\Delta \bar{c} = 0.$$

Таким образом, при $h > 1$ перенос происходит в режиме классической диффузии. Отметим, что классический скейлинг $\Delta_i = -2$ отличается от вытекающего из (2.21) при $h > 1$. Это неудивительно, поскольку, как мы только что убедились, перенос при $h > 1$ определяется корреляционными свойствами скорости на малых расстояниях $r \sim a$, где масштабная инвариантность, необходимая для выполнения равенства (2.20), отсутствует.

2. $h < 1$. Из соотношений (2.23) и (2.24) следует, что основной вклад в интеграл (2.15) при $h < 1$ дается областью больших расстояний ($r \gg a$). Поэтому для функции $f_{ij}(\vec{r}, t)$ под интегралом в (2.15) можно воспользоваться выражением (2.23). Тогда функция $M(\vec{k}, p)$ приобретает вид

$$M(\vec{k}, p) = -k_i k_j (Va^h)^2 \int_0^\infty dt e^{-pt} \int d^3 \vec{r} \frac{e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{r^{3+2h}} \chi_{ij} \left(\vec{n}, \frac{r}{(Va^h t)^{1/(1+h)}} \right), \quad h < 1. \quad (2.26)$$

Вместо \vec{r} и t перейдем в (2.26) к новым переменным интегрирования

$$y = kr, \quad \xi = \frac{r}{(Va^h t)^{1/(1+h)}}.$$

В результате выражение (2.26) преобразуется к виду

$$M(\vec{k}, p) = -(1+h) Va^h k^{1+h} m_i m_j \times \\ \times \int d\omega_{\vec{n}} \int_0^\infty \frac{dy}{y^h} e^{-iy(\vec{m}\vec{n})} \int_0^\infty \frac{d\xi}{\xi^{2+h}} \chi_{ij}(\vec{n}, \xi) \exp \left\{ - \left(\frac{y}{\xi \sqrt{\eta}} \right)^{1+h} \right\}, \quad (2.27)$$

где $d\omega_{\vec{n}}$ — элемент телесного угла в направлении вектора $\vec{n} \equiv \frac{\vec{r}}{r}$; $\vec{m} = \frac{\vec{k}}{k}$.

Переменная η определена равенством

$$\eta = k^2 \left(\frac{p}{Va^h} \right)^{-\frac{2}{1+h}}. \quad (2.28)$$

Отметим, что для сходимости интеграла в (2.27) при $\xi \rightarrow 0$ и любых значениях η необходимо, чтобы при $\xi \rightarrow 0$ имело место $\chi_{ij} \propto o(\xi^{1+h})$, т. е.

$f_{ij}(\vec{r}, t) \propto o\left(\frac{1}{t}\right)$ при $t \rightarrow \infty$ и фиксированном r . Это мягкое условие на быстроту забывания прошлого (в некотором смысле слабую марковость) будем считать выполненным. Отметим также, что сходимость интеграла по переменной y в (2.27) при $h < 1$ является очевидной.

Из (2.14) с учетом (2.27) и (2.28) получаем следующее представление для функции Грина:

$$G\{\vec{k}, p\} = \frac{1}{p[1 + \varphi(\eta)]}, \quad (2.29)$$

где

$$\begin{aligned} \varphi(\eta) = & -(1+h)\eta^{\frac{1+h}{2}} m_i m_j \times \\ & \times \int dO_{\vec{n}} \int_0^{\infty} \frac{dy}{y^h} e^{-iy(\vec{m}\vec{n})} \int_0^{\infty} \frac{d\xi}{\xi^{2+h}} \chi_{ij}(\vec{n}, \xi) \exp\left\{-\left(\frac{y}{\xi\sqrt{\eta}}\right)^{1+h}\right\}. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Полезно также, произведя замену переменной $y \rightarrow y\xi\sqrt{\eta}$, переписать соотношение (2.30) в следующей форме:

$$\begin{aligned} \varphi(\eta) = & -(1+h)\eta m_i m_j \int dO_{\vec{n}} \int_0^{\infty} \frac{dy}{y^h} \exp[-iy(\vec{m}\vec{n})\xi\sqrt{\eta}] \times \\ & \times \int_0^{\infty} \frac{d\xi}{\xi} \chi_{ij}(\vec{n}, \xi) \exp\{-y^{1+h}\}. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Рассмотрим свойства функции $\varphi(\eta)$. Из выражения (2.31) следует, что при малых значениях аргумента она является аналитической, причем регулярное разложение начинается с члена $\sim \eta$:

$$\varphi(\eta) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \eta^n \quad \text{при } \eta \ll 1. \quad (2.32)$$

С другой стороны, из (2.30) видно, что при больших значениях аргумента функция $\varphi(\eta)$ имеет вид

$$\varphi(\eta) \sim \eta^{\frac{1+h}{2}} \quad \text{при } \eta \gg 1. \quad (2.33)$$

Такая дробно-степенная асимптотика свидетельствует о том, что при конечном ненулевом значении переменной η функция $\varphi(\eta)$ имеет точку ветвления. Поскольку при действительных положительных η она сама является вещественной, точка ветвления должна быть действительной и отрицательной ($\eta = \eta_b < 0$). Принимая во внимание регулярный множи-

тель η в равенстве (2.31) справа, с учетом асимптотики (2.33) приходим к выводу, что при $\eta \rightarrow \eta_b$ функция $\varphi(\eta)$ имеет структуру

$$\varphi(\eta) \sim \eta(\eta - \eta_b)^{\frac{1-h}{2}} \quad \text{при } |\eta - \eta_b| \ll 1. \quad (2.34)$$

Отсюда следует, что вблизи точки ветвления $\varphi(\eta)$ стремится к бесконечности.

Рассмотрим действительные неотрицательные η . Из (2.16) следует, что выражение $1 + \varphi(\eta)$ (принимаяющее тоже действительные положительные значения) не имеет нулей при таких η . Учитывая, что справа вблизи $\eta = \eta_b$, т. е. при $\eta_b < 0$, $\varphi(\eta) \rightarrow -\infty$ (см. (2.34)), приходим к выводу, что выражение $1 + \varphi(\eta)$ имеет хотя бы один нуль при отрицательном η таком, что $|\eta| < |\eta_b|$. Обозначим η_0 ближайший из них к началу координат ($\eta_0 < 0$ и $|\eta_0| < |\eta_b|$).

В дальнейшем нас будут интересовать свойства распределения концентрации на временах, когда размер основной области локализации примеси много больше первоначального размера: $R(t) \gg R(0)$. Тогда согласно (2.12) находим

$$\bar{c}(\vec{r}, t) \cong N G(\vec{r}, t), \quad R(t) \gg R_0, \quad (2.35)$$

где $N = \int d^3 r c^{(0)}(\vec{r}) = \int d^3 r \bar{c}(\vec{r}, t)$ — полное число частиц.

Переходя в (2.14) с учетом (2.29) в координатно-временное представление и используя (2.35), приходим к равенству

$$\bar{c}(\vec{r}, t) = N \int_{p_0 - i\infty}^{p_0 + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int \frac{d^3 \vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{pt + i\vec{k}\vec{r}}}{p(1 + \varphi(\eta))}, \quad \text{Re } p_0 > 0, \quad (2.36)$$

где переменная η определена (2.28).

Переходя в (2.36) от интегрирования по p и \vec{k} к безразмерным переменным согласно

$$\begin{aligned} p &\rightarrow \bar{p} = pt, \\ k &\rightarrow \bar{k} = kR(t) \bar{p}^{\frac{1}{1+h}}, \end{aligned} \quad (2.37)$$

$$R(t) = (Va^h t)^{1/(1+h)}, \quad (2.38)$$

получаем

$$\bar{c}(\vec{r}, t) = \frac{N}{R^3(t)} \Phi(\xi), \quad (2.39)$$

где функция $\Phi(\xi)$ определяется выражением

$$\Phi(\xi) = \int_{\bar{p}_* - i\infty}^{\bar{p}_* + i\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi i} \bar{p}^{\frac{2-h}{1+h}} \int d\Omega_{\vec{m}} \int_0^\infty \frac{\bar{k}^2 dk}{(2\pi)^3} \frac{\exp\left\{\bar{p} + i\bar{k}\xi\bar{p}^{\frac{1}{1+h}}(\vec{m}\vec{n})\right\}}{1 + \varphi(\bar{k}^2)}, \quad \text{Re } \bar{p}_* > 0, \quad (2.40)$$

в котором

$$\xi = \frac{r}{R(t)}, \quad (2.41)$$

$d\Omega_{\vec{m}}$ — элемент телесного угла в направлении единичного вектора \vec{m} .
Функция $\Phi(\xi)$ обладает свойствами

$$\Phi(0) \sim 1, \quad \Phi(\xi)\Big|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow 0.$$

Величина $R(t)$ в (2.41), данная (2.38), определяет по порядку величины размер области локализации в момент t (при $R(t) \gg R_0$). Показатель в зависимости $R(t) \propto t^\gamma$ равен $\gamma = 1/(1+h)$. Следовательно, при $h < 1$ имеет место $\gamma > 1/2$, и в этом случае перенос примеси происходит в режиме супердиффузии.

3. $h=1$. Попытка рассмотреть этот случай как предел $h \rightarrow 1$ с использованием функции отклика (2.23) приводит к логарифмической расходимости в (2.11). Отсюда заключаем, что классическая автомоделная переменная $\xi \sim r/\sqrt{Dt}$ с $D \sim Va$, от которой решение зависело при $h > 1$, должна быть модифицирована слабой функцией координат логарифмического типа:

$$\xi = r/\sqrt{D(r)t}. \quad (2.42)$$

Это означает, что при $r \leq R(t)$ и $R(t) \gg R(0)$ соотношение между плотностью потока $\bar{q}(\bar{r}, t)$ и концентрацией должно иметь форму

$$\bar{q}(\bar{r}, t) = -D(r) \nabla \bar{c}(\bar{r}, t) \quad (2.43)$$

с координатой \bar{r} , отсчитанной от центра начального распределения частиц. Подставляя (2.42) в выражение (2.23), а затем последнее — в (2.11), находим из (2.43)

$$\frac{dD(r)}{dr} \sim \frac{(Va)^2}{rD(r)}. \quad (2.44)$$

Отсюда следует

$$D(r) = \tilde{D} \ln^{1/2} \left(\frac{r}{a} \right), \quad \tilde{D} \sim Va. \quad (2.45)$$

Подставляя это равенство в соотношение (2.42), получаем оценку для размера области локализации частиц на больших временах:

$$R(t) \sim \sqrt{\tilde{D}t} \ln^{\frac{1}{4}} \left(\frac{\sqrt{\tilde{D}t}}{a} \right) \text{ при } h = 1. \quad (2.46)$$

Подставляя (2.42) и (2.45) в (2.26), находим выражение для поляризационного оператора при действительных и положительных значениях переменных p и k :

$$M(\bar{k}, p) \cong -\tilde{D}k^2 \ln^{1/2} \mu, \quad \tilde{D} \sim Va, \quad \mu = \min \left\{ (ka)^{-1}, \sqrt{\frac{\tilde{D}}{a^2 p}} \right\}. \quad (2.47)$$

Подстановка этого выражения в (2.14) с последующим выполнением обратного преобразования Фурье—Лапласа и с учетом (2.35) приводит к выражению для концентрации на достаточно больших ($R(t) \gg R(0)$) временах при $h = 1$:

$$\bar{c}(\bar{r}, t) \cong \frac{N}{\left\{4\pi\tilde{D}t \ln^{1/2} \frac{\tilde{D}t}{a}\right\}^{\frac{3}{2}}} \exp\left\{-\frac{r^2}{4\tilde{D}t \ln^{1/2} \frac{\tilde{D}t}{a}}\right\}, \quad (2.48)$$

которое справедливо в логарифмическом приближении.

Таким образом, при масштабной размерности скорости $h = 1$ перенос примеси происходит в логарифмически модифицированном классическом режиме.

2.4. Асимптотические профили концентрации ¹

Проанализируем асимптотическое поведение концентрации на расстояниях, больших по сравнению с размером основной области локализации, т. е. при значениях автомодельной переменной $\xi = r/R(t) \gg 1$. При масштабных размерностях скорости $h > 1$ и $h = 1$ асимптотическое поведение определяется общими формулами для концентрации в этих случаях (для $h = 1$ — формула (2.48)). В обоих случаях асимптотики являются гауссовыми,

$$\bar{c}(\bar{r}, t) \propto \exp\{-\xi^2\},$$

с тем лишь различием, что при $h > 1$ имеем $\xi = r/\sqrt{4Dt}$, а при $h = 1$ — $\xi = r/\sqrt{4\tilde{D}t \ln^{1/2}(\tilde{D}t/a)}$.

Займемся теперь выяснением асимптотической структуры концентрации при $h < 1$. Выполнив в выражении (2.40) интегрирование по угловым переменным с учетом четности по \bar{k} множителя при экспоненте, приходим к равенству

$$\Phi(\xi) = \frac{1}{\xi} \int_{\bar{p}_* - i\infty}^{\bar{p}_* + i\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi i} \bar{p}^{\frac{1-h}{1+h}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{k}d\bar{k}}{(2\pi)^2 i} \frac{\exp\left\{\bar{p} + i\bar{k}\xi \bar{p}^{\frac{1}{1+h}}\right\}}{1 + \varphi(\bar{k}^2)}, \quad \text{Re } \bar{p}_* > 0. \quad (2.49)$$

В предыдущем подразделе было показано, что функция $1 + \varphi(\eta)$ имеет нуль при $\eta = \eta_0$. Величина η_0 действительна, отрицательна и по абсолют-

¹ По материалам [36; 37].

ной величине меньше, чем точка ветвления η_b ; при этом η_0 обозначен самый близкий к $\eta = 0$ нуль функции $1 + \varphi(\eta)$. Учитывая, что η_b является самой близкой к $\eta = 0$ особенностью функции $\varphi(\eta)$, приходим к выводу, что в плоскости переменной \bar{k} ближайшими к действительной оси особенностями подынтегрального выражения в (2.49) являются полюсы $\bar{k}_0 = \pm i\sqrt{|\eta_0|}$. Они и определяют асимптотику функции $\Phi(\xi)$ при $\xi \gg 1$.

Сдвигая контур интегрирования по переменной \bar{k} в верхнюю полуплоскость, как показано на рис. 2.1, находим

$$\Phi(\xi) \cong \frac{1}{4\pi\varphi'_0\xi} \int_{\bar{p}_* - i\infty}^{\bar{p}_* + i\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi i} \bar{p}^{\frac{1-h}{1+h}} \exp\{-\Gamma(\bar{p})\}, \quad \text{Re } \bar{p}_* > 0, \quad (2.50)$$

где

$$\Gamma(\bar{p}) = \xi\sqrt{|\eta_0|} \bar{p}^{\frac{1}{1+h}} - \bar{p}, \quad \varphi'_0 = \left. \frac{d\varphi}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_0}. \quad (2.51)$$

Вычисляя оставшийся в (2.50) интеграл по переменной \bar{p} методом перевала (см. [38; 39]), приходим к выражению

$$\Phi(\xi) \cong \frac{1}{(4\pi)^{3/2} \varphi'_0 \xi} \sqrt{\frac{2}{|\Gamma''_0|}} \bar{p}_0^{(1-h)/(1+h)} \exp\{-\Gamma\}, \quad (2.52)$$

где \bar{p}_0 — точка перевала, определяемая уравнением

$$\left. \frac{d\Gamma(\bar{p})}{d\bar{p}} \right|_{\bar{p}=\bar{p}_0} = 0. \quad (2.53)$$

Другие обозначения, использованные в (2.52), таковы:

$$\Gamma = \Gamma(\bar{p}_0), \quad \Gamma'' = \left. \frac{d^2\Gamma(\bar{p})}{d\bar{p}^2} \right|_{\bar{p}=\bar{p}_0}. \quad (2.54)$$

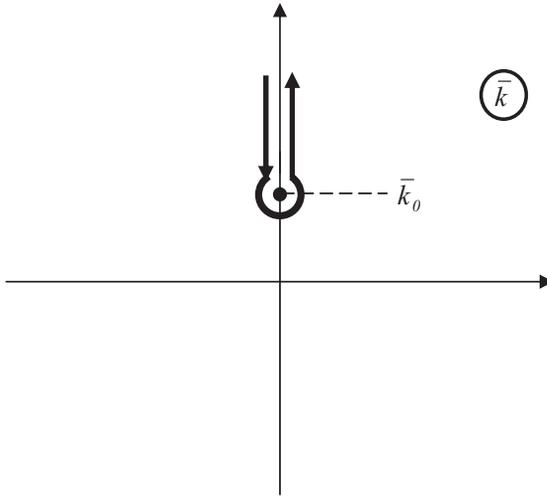


Рис. 2.1. Контур интегрирования по \bar{k} в (2.49), сдвинутый в верхнюю полуплоскость

Решение уравнения (2.53) с учетом (2.51) дает

$$\bar{p}_0 = \left(\xi \frac{\sqrt{|\eta_0|}}{1+h} \right)^{\frac{1+h}{h}}. \quad (2.55)$$

Раскрывая с помощью (2.55) равенства (2.54), подставляя их затем в (2.52), а после этого результат — в (2.39), находим асимптотику концентрации при $\bar{\xi} \gg 1$:

$$\bar{c}(\bar{r}, t) \cong \frac{A}{\{4\pi R^2(t)\}^{\frac{3}{2}}} \varepsilon^{3(1-2h)/2h} \exp\left(-h\varepsilon^{\frac{1+h}{h}}\right), \quad (2.56)$$

где

$$A = \sqrt{\frac{2|\eta_0|}{h(1+h)}} \frac{1}{\varphi'_0}, \quad \varepsilon = \xi \frac{\sqrt{|\eta_0|}}{1+h}, \quad \varphi'_0 = \left. \frac{d\varphi}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_0}. \quad (2.57)$$

Поскольку при $h < 1$ имеем $(1+h)/h > 2$, хвост концентрации в модели случайной адвекции при $h < 1$ согласно (2.56) имеет вид экспоненты, более сжатой, чем гауссиана. Другими словами, концентрация в режиме супердиффузии убывает даже быстрее, чем при классической диффузии.

Этот вывод резко отличается от выводов дробно-диффузионной (с дробной производной по пространству) модели, где хвосты ведут себя степенным образом.

На наш взгляд, это расхождение не случайно. В самом деле, физическая по своей природе модель случайной адвекции учитывает, что распределение скоростей определяется функционалом, убывающим на больших абсолютных величинах очень круто (по существу поле скорости ограничено по величине); это следует непосредственно из факта существования корреляционных функций скорости (т. е. моментов функционала распределения) сколь угодно высокого порядка. В результате медленное степенное убывание концентрации на больших расстояниях оказывается невозможным, несмотря даже на то, что корреляторы скоростей спадают самым медленным из возможных (если не считать логарифмического), степенным образом. Модель же дробной диффузии, будучи чисто математической, указанный физический принцип игнорирует, и соответственно ограничения на характер убывания концентрации на больших расстояниях в ней нет.

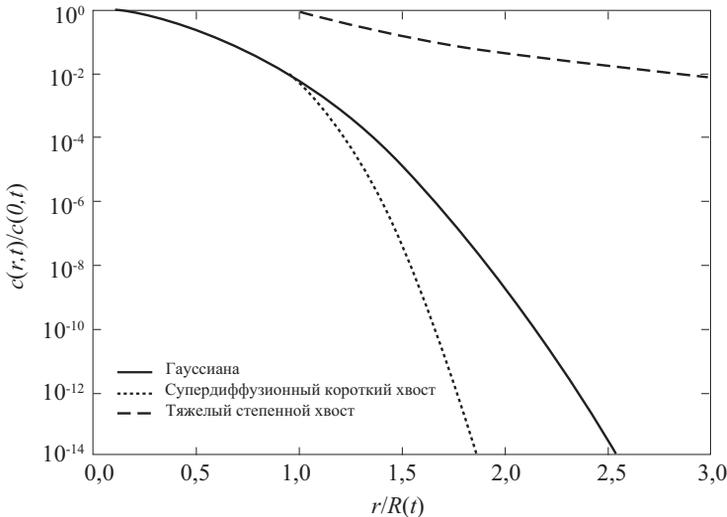


Рис. 2.2. Асимптотические профили концентрации в трех моделях: классической диффузии (гауссиана), случайной адвекции при $h = 0,5$ (супердиффузионный — «короткий» — хвост) и дробной диффузии («тяжелый» степенной хвост)

На рис. 2.2 изображены асимптотические зависимости концентрации в исследованной здесь нами модели случайной адвекции, а также в моделях

дробной диффузии и классической диффузии. Видно, что различие между предсказаниями разных моделей для концентрации на больших расстояниях $r \gg R(t)$ (т. е. при $\xi \gg 1$) достигает многих порядков.

3. Случайная адвекция во фрактальной среде с конечным радиусом корреляции

В предыдущем разделе был исследован перенос примеси в стационарном поле с медленным (степенным) убыванием корреляций, простирающемся до бесконечности. Обычно в реальных физических системах пространственный диапазон фрактального поведения, приводящего к дальнедействующим корреляциям, бывает конечным. Это может быть связано либо с ограниченными размерами системы, либо с конечным радиусом корреляции. В случае перколяционных сред корреляционная длина, как было отмечено во введении, уменьшается по мере удаления состояния среды от порога протекания. В задаче о протекании жидкости по системе трещин указанное обстоятельство приводит к появлению средней скорости течения [33]. Целью настоящего раздела является исследование вопроса о том, как наличие конечного радиуса корреляции и, следовательно, средней скорости меняет режим переноса во фрактальной среде, а также к какому поведению в хвостах профиля концентрации это приводит.

3.1. Постановка задачи

Как и в предыдущем разделе, перенос примеси в заданном стационарном поле скоростей $\vec{v}(r)$ будем описывать уравнением (2.1). Поле скоростей удовлетворяет условию несжимаемости (2.2). Как и прежде, будем рассматривать задачу при заданном начальном условии для концентрации: $c(\vec{r}, t=0) = c_0(\vec{r})$. В соответствии со сказанным выше конечность корреляционного радиуса ξ приводит к тому, что сильно флуктуирующую скорость можно представить в виде

$$\vec{v}(\vec{r}) = \vec{u} + \vec{V}(\vec{r}), \quad (3.1)$$

где

$$\langle \vec{v}(\vec{r}) \rangle = \vec{u}, \quad \langle \vec{V}(\vec{r}) \rangle = 0, \quad (3.2)$$

а под $\langle \rangle$ подразумевается усреднение по ансамблю реализаций.

На масштабах, меньших ξ , среда имеет фрактальные свойства, и парный коррелятор флуктуирующей компоненты скорости имеет тот же вид, что и в случае $\xi \rightarrow \infty$:

$$K_{ij}^{(2)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \langle V_i(\vec{r}_1) V_j(\vec{r}_2) \rangle \propto V^2 \left(\frac{a}{r} \right)^{2h}, \quad (3.3)$$

где $r = |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, a — нижняя граница интервала фрактальности; V^2 определяет характерную величину $K_{ij}^{(2)}$ при $r \leq a$. За пределами интервала фрактальности, на расстояниях $r \gg \xi$, корреляции убывают экспоненциально быстро.

С учетом этих свойств Фурье-образ парной корреляционной функции принимает вид

$$K_{ij}^{(2)}\{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \xi\} = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2) K_{ij}^{(2)}\{\vec{k}_1, \xi\}, \quad (3.4)$$

$$K_{ij}^{(2)}\{\vec{k}, \xi\} \propto V^2 a^{2h} \begin{cases} k^{2h-3}, & k \gg \xi^{-1}; \\ \xi^{3-2h}, & k \ll \xi^{-1}, \end{cases} \quad (3.5)$$

где $k = |\vec{k}|$.

Отсюда видно, что $K_{ij}^{(2)}\{\vec{k}, \xi\}$ является однородной функцией переменных \vec{k} и ξ^{-1} :

$$K_{ij}^{(2)}\{\lambda \vec{k}, \xi/\lambda\} = \lambda^{2h-3} K_{ij}^{(2)}\{\vec{k}, \xi\}. \quad (3.6)$$

По аналогии с теорией критических явлений [34; 35] будем называть параметр h масштабной размерностью флуктуирующей скорости $\vec{V}(\vec{r})$. Аналогичные соотношения справедливы для многоточечных корреляторов скорости.

Согласно результатам предыдущего раздела режим аномальной диффузии в модели случайной адвекции (при условии $\xi \rightarrow \infty$) возникает, только когда показатель степени в выражении для коррелятора (3.3) меньше 2, т. е. $h < 1$. Ниже мы рассматриваем именно этот нетривиальный случай.

3.2. Функция Грина и масштабный анализ

Концентрацию примеси в произвольный момент времени можно выразить через ее начальное распределение с помощью функции Грина $\widehat{G}(\vec{r}, \vec{r}'; t)$:

$$\widehat{c}(\vec{r}, t) = \int d^3 r' \widehat{G}(\vec{r}, \vec{r}'; t) c_0(\vec{r}'). \quad (3.7)$$

Функция $\widehat{G}(\vec{r}, \vec{r}'; t)$ является решением уравнения

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + v_i(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} \right\} \widehat{G}(\vec{r}, \vec{r}'; t) = 0 \quad (3.8)$$

с начальными условиями

$$\widehat{G}(\vec{r}, \vec{r}', 0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'). \quad (3.9)$$

Концентрация, усредненная по ансамблю реализаций среды $c(\vec{r}, t) \equiv \langle \widehat{c}(\vec{r}, t) \rangle$, которая и представляет практический интерес, удовлетворяет соотношению (3.7) с заменой \widehat{G} на G , где $G(\vec{r} - \vec{r}', t) \equiv \langle \widehat{G}(\vec{r}, \vec{r}'; t) \rangle$ есть усредненная функция Грина (которую ниже будем для краткости просто называть функцией Грина). Вычисление этой функции будем проводить методом крестовой диаграммной техники, изложенным в книге [40] и впоследствии применялась к описанию процессов переноса в неупорядоченных средах в [12; 41].

Первоначально такая техника предназначалась для расчета электронной функции Грина в металлических сплавах (см. [40]). В нашей задаче аналогом потенциальной энергии взаимодействия электрона с примесью согласно уравнению (3.8) является оператор $v_i(\vec{r}) \partial / \partial x_i$. С учетом этого обстоятельства выписываем ряд теории возмущений для функции Грина, описывающей эволюцию концентрации примеси. После этого усредняем этот ряд по ансамблю реализаций поля скоростей аналогично тому, как проводилось усреднение по расположению атомов примеси в [40].

В результате для усредненной функции Грина получаем уравнение Дайсона, которое в представлении Фурье — Лапласа имеет вид

$$G\{\vec{k}, p\} = \frac{1}{p + i\vec{k}\vec{u} - M\{\vec{k}, p\}}, \quad (3.10)$$

где p — переменная Лапласа; $M\{\bar{k}, p\}$ — «массовый» оператор, определяемый суммой неприводимых скелетных диаграмм [40]:

$$M\{\bar{k}, p\} = \text{---} \times \text{---} \times + \begin{array}{c} \circ \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \\ \times \end{array} + \text{---} \times \times \text{---} \times + \begin{array}{c} \circ \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ | \\ \times \end{array} + \dots \quad (3.11)$$

Здесь горизонтальные линии соответствуют функции Грина G , кресты — оператору возмущения вида

$$\hat{T} = -V_i \frac{\partial}{\partial x_i}. \quad (3.12)$$

Штриховые линии объединяют кресты, относящиеся к одному из кумулянтов, разложение по которым составляет суть процедуры усреднения по ансамблю реализаций. Каждой исходящей из креста штриховой линии отвечает свой волновой вектор, по которому происходит интегрирование. В каждом кресте, где сходятся три линии, выполняется закон сохранения волнового вектора. После подстановки (3.10) в диаграммное разложение (3.11) последнее превращается в интегральное уравнение для функции $M\{k, p\}$.

В теории примесных металлов [40] были использованы существенные упрощения, связанные с малой концентрацией примеси и близостью импульсов электронов к поверхности Ферми. Это позволило при расчете $M\{k, p\}$ ограничиться первой скелетной диаграммой в разложении (3.11). В нашем случае такое упрощение невозможно, поскольку все диаграммы в (3.11) одного порядка. Однако корреляционные функции, по которым производится разложение, обладают свойством масштабной инвариантности (3.6). Поэтому естественно предположить (а затем и доказать), что и сам массовый оператор обладает данным свойством. Согласно этому предположению масштабные соотношения для функции $M\{k, p\}$ должны иметь вид

$$M\{\lambda^{-1}\bar{k}, \lambda^{-\Delta} p, \lambda \xi\} = \lambda^{-\Delta} M\{\bar{k}, p, \xi\}. \quad (3.13)$$

Здесь также учтено, что масштабные размерности переменной Лапласа Δ и массового оператора равны, что вытекает из того, что обе эти величины входят в выражение (3.10) аддитивно.

Рассмотрим произвольное слагаемое разложения (3.11), содержащее, например, n -точечную корреляционную функцию. Масштабный индекс этого слагаемого есть сумма индексов элементов этой диаграммы. Эти элементы включают n -точечный коррелятор (масштабный индекс $n(h-3)$), n градиентов (n), $n-1$ функцию Грина $((n-1)\Delta_G)$, и $3n$ -мерный дифференциал волнового вектора ($3n$). (Поскольку волновой вектор \vec{q} , используемый как переменная интегрирования, входит в выражения аддитивно с \vec{k} , его масштабный индекс совпадает с индексом \vec{k} .) Сумма перечисленных индексов должна равняться масштабной размерности M , откуда получаем

$$\Delta = n + (n-1)\Delta_G + n(h-3) + 3n. \quad (3.14)$$

Принимая во внимание, что согласно определению масштабные размерности Фурье-Лаплас-образа функции Грина Δ_G и переменной Лапласа Δ связаны равенством

$$\Delta_G = -\Delta, \quad (3.15)$$

приходим к соотношению

$$\Delta = 1 + h, \quad (3.16)$$

не зависящему от порядка диаграммы. Поскольку соотношение (3.15) с $\Delta = 1 + h$ справедливо для каждого слагаемого разложения (3.11), оно справедливо и для всего ряда в целом.

Исходя из установленных соотношений, можно представить массовый оператор в общем виде:

$$M\{\vec{k}, p\} = -pF(\eta, k\xi), \quad \eta = k^2 \left(\frac{Va^h}{p} \right)^{2/(1+h)}, \quad (3.17)$$

где F — безразмерная функция двух безразмерных переменных, а множитель Va^h получен с учетом соотношения (3.3).

Еще один вывод касается средней скорости \vec{u} . Поскольку скорость адвекции $\vec{V}(r)$ и \vec{u} имеют одну и ту же физическую размерность, они должны иметь и одинаковую масштабную размерность. Откуда следует

$$\Delta_u = \Delta_v = h. \quad (3.18)$$

Принимая во внимание, что средняя скорость может зависеть только от корреляционного радиуса, получаем

$$u \sim V \left(\frac{a}{\xi} \right)^h. \quad (3.19)$$

Отметим, что в пределе $\xi \rightarrow \infty$ имеем $u = 0$.

3.3. Асимптотики массового оператора

Исследование массового оператора начнем с анализа первой диаграммы уравнения (3.11)

$$M \{ \bar{k}, p \} \approx -k_i k_j \int \frac{K_{ij}^{(2)} \{ \bar{q}, \xi \} d^3 q}{p + i\bar{k}\bar{u} - i\bar{q}\bar{u} - M \{ \bar{k} - \bar{q}, p \}}. \quad (3.20)$$

Рассмотрим два предельных случая. В первом из них справедливо соотношение

$$\max \left\{ k, \left(\frac{p}{Va^h} \right)^{\frac{1}{1+h}} \right\} \gg \xi^{-1}. \quad (3.21)$$

В пределе $\xi \rightarrow \infty$ массовый оператор определяется выражениями, полученными в предыдущем разделе. Оттуда же следует, что интеграл (3.20) (в пределе $\xi \rightarrow \infty$) определяется следующими значениями переменной интегрирования:

$$q \geq k, \text{ когда } p \leq Va^h k^{1+h}, \text{ и } q \geq \left(p/Va^h \right)^{\frac{1}{1+h}}, \text{ когда } p \geq Va^h k^{1+h}. \quad (3.22)$$

Следовательно, при конечных значениях ξ , удовлетворяющих неравенству (3.21), для функции $K_{ij}^{(2)} \{ \bar{q}, \xi \}$ в подынтегральном выражении (3.20) справедливо выражение из первой строчки соотношения (3.5), а членами $i\bar{q}\bar{u}$ и $i\bar{k}\bar{u}$ в знаменателе (3.20) можно пренебречь:

$$M \{ \bar{k} - \bar{q}, p \} \sim Va^h q^{1+h} \gg qu, ku.$$

Это выражение остается справедливым для всех диаграмм высших порядков разложения (3.11). В результате выражение для массового оператора $M \{ k, p \}$ в пределе (3.21) принимает вид

$$M\{\vec{k}, p\} = -pF(\eta, k\xi) \approx -pF(\eta, \infty) = -p\varphi(\eta), \quad (3.23)$$

где свойства функции $\varphi(\eta)$ описаны в предыдущем разделе.

В противоположном пределе

$$\max\left\{k, \left(\frac{p}{Va^h}\right)^{\frac{1}{1+h}}\right\} \ll \xi^{-1} \quad (3.24)$$

основной вклад в интеграл (3.20) дают значения q порядка ξ^{-1} . Поэтому в знаменателе выражения (3.20) можно пренебречь как p , так и $i\vec{k}\vec{u}$, и положить $M\{\vec{k} - \vec{q}, p\} \cong M\{-\vec{q}, 0\} \sim Va^h q^{1+h}$. В результате интеграл не зависит от p , и \vec{k} оказывается порядка $u\xi$. Это же справедливо и для интегралов в высших диаграммах разложения (3.11). В итоге массовый оператор принимает вид

$$M\{\vec{k}, p\} \approx -Dk^2, \quad (3.25)$$

где в соответствии с (3.19) эффективный диффузионный коэффициент

$$D \sim u\xi. \quad (3.26)$$

3.4. Поведение концентрации частиц ²

При достаточно больших значениях времени, когда размер облака частиц существенно превосходит начальный размер, функция Грина непосредственно описывает поведение концентрации. Функция $G(\vec{r}, t)$ определяется обратным Фурье—Лаплас-преобразованием функции (3.10):

$$G(\vec{r}, t) = \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{\exp(i\vec{k}\vec{r} + pt)}{p + i\vec{k}\vec{u} - M(\vec{k}, p)}, \quad \text{Re } b > 0. \quad (3.27)$$

Анализ показывает, что поведение системы принципиально различно в двух временных интервалах, граница между которыми определяется выражением

$$t_* = \frac{\xi}{u} \approx \frac{\xi^{1+h}}{Va^h}. \quad (3.28)$$

² По материалам [37; 42].

В интервале $t \ll t_*$ для основного облака частиц переменная Лапласа в подынтегральном выражении (3.27) удовлетворяет условию $p \sim t^{-1} \gg t_*^{-1} \approx Va^h \xi^{-(1+h)}$. Следовательно, выполняется неравенство (3.21), и для массового оператора справедливо выражение (3.23). В этом случае характерные значения k в (3.27) порядка $k \sim (p/Va^h)^{1/(1+h)}$. Отсюда следует неравенство $ku \ll p, M$, и, следовательно, можно пренебречь членом $i\bar{k}\bar{u}$ в знаменателе (3.27). Это тем более верно в области хвостов, поскольку здесь $p \gg t^{-1}$. Поэтому в интервале $t \ll t_*$ дисперсия примеси происходит в режиме супердиффузии, изученном в предыдущем разделе. В этом режиме зависимость размера области локализации частиц примеси от времени определяется формулой (2.38), а асимптотическая структура концентрации устанавливается соотношением (2.56).

На больших временах $t \gg t_*$ для основного облака частиц имеем оценку $p \sim t^{-1} \ll t_*^{-1}$, откуда следует, что в этом случае справедливо неравенство (3.24). Поэтому выражение для массового оператора принимает вид (3.25), и интеграл в (3.27) приводит к классическому диффузионному выражению

$$\bar{G}(\bar{r}, t) \approx (4\pi Dt)^{-\frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{(\bar{r} - \bar{u}t)^2}{4Dt}\right). \quad (3.29)$$

Эти результаты находятся в соответствии с предположением работы [43], где дисперсия частиц во фрактальной среде с конечным радиусом корреляции исследовалась численно.

Рассмотрим теперь область далеких хвостов. Как следует из вычислений, характерные величины волнового вектора, определяющие значение интеграла в (3.27), можно оценить как

$$k \sim \max\left\{\frac{1}{\sqrt{Dt}}, \frac{r}{2Dt}\right\}, \quad (3.30)$$

и на расстояниях

$$r \gg ut \quad (3.31)$$

условие (3.24) нарушается. Поэтому в области (3.31) вычисления в (3.27) должны проводиться с использованием выражения для массового опера-

тора в пределе $\xi \rightarrow \infty$ (см. предыдущий раздел). В результате на расстояниях $r \gg ut$ хвост концентрации имеет супердиффузионный вид (2.56).

В итоге хвост в интервале $t \gg t_*$ принимает двухступенчатый вид, так что его ближняя часть соответствует классическому диффузионному переносу, а дальняя описывается супердиффузионным выражением (2.56). Сравнивая (2.56) с (3.29), видим, что дальняя (супердиффузионная) часть хвоста убывает быстрее, чем его ближняя часть.

Переход от одной части хвоста к другой происходит на расстояниях $r_* \sim ut$. Характерную величину концентрации на этих расстояниях можно оценить как

$$c(r_*, t) \propto \exp\left(-A \frac{t}{t_*}\right), \quad (3.32)$$

где $A \sim 1$.

Отметим, что время t_* перехода от супердиффузионного режима к классической диффузии (соотношение (3.28)) можно интерпретировать несколькими разными способами. С одной стороны, на временах $t \sim t_* = \frac{\xi^{1+h}}{Va^h}$ размер облака частиц становится порядка корреляционной длины $R(t_*) \sim \xi$. Поэтому на временах $t > t_*$ среда представляется статистически однородной, и, следовательно, дисперсия частиц растет по классическому диффузионному закону (3.29). С другой стороны, из оценки $R(t_*) \sim \xi$ следует соотношение

$$\frac{R(t_*)}{u} \sim \frac{\xi}{u} \sim \frac{\xi^{1+h}}{Va^h} \sim \frac{\xi^2}{D}, \quad (3.33)$$

которое означает, что на временах $t \sim t_*$ размер облака частиц, определяемый независимо супердиффузией либо классической диффузией, становится сравнимым со смещением ut_* , обусловленным дрейфом со средней скоростью u .

3.5. Выводы

В данном разделе исследовано влияние конечности корреляционного радиуса фрактальной среды на процесс переноса частиц случайной адвекцией. Найдено характерное время t_* , которое разделяет интервалы раз-

личных режимов переноса. На ранних временах $t \ll t_*$ перенос происходит в режиме супердиффузии, изученном в предыдущей главе. На поздней стадии $t \gg t_*$ (когда размер облака частиц становится больше корреляционной длины) этот режим переходит в режим классической диффузии с эффективным коэффициентом диффузии, определяемым произведением средней скорости адвекции на корреляционную длину. Однако на данных временах классический гауссов профиль имеет место только в области основного облака и ближней части хвоста концентрации. Вне этой области (в далеком участке концентрационного хвоста) профиль концентрации описывается супердиффузионной асимптотикой.

4. Субдиффузия в регулярно-неоднородной резко контрастной среде. Модель Дыхне

В настоящем разделе анализируется перенос примеси в регулярно-неоднородной системе, состоящей из среды с высокой проницаемостью, занимающей область I , ограниченную в одном или двух измерениях, и среды с низкой проницаемостью, заполняющей оставшуюся часть пространства (область II). В качестве физического механизма переноса частиц рассматривается классическая диффузия. Задача была впервые сформулирована академиком А. М. Дыхне, и в его честь мы называем ее моделью Дыхне. Применительно к переносу примеси в геологических породах модель учитывает принципиальную особенность этих сред — резкий контраст в пространственном распределении структурных характеристик. В этом смысле можно говорить, что среда в области I имитирует трещину, а область II соответствует матрице скальной породы.

В данном разделе формулируется постановка задачи с одиночной трещиной (подраздел 4.1), дается качественный вывод дисперсии примеси (4.2), проводится количественный анализ дисперсии и асимптотической структуры концентрации (4.3 и 4.4), представляются качественные результаты для переноса примеси в резко-контрастной среде с множеством трещин (4.5) и делаются общие выводы (4.6).

4.1. Постановка задачи

В области I концентрация частиц $c(\vec{r}, t)$ удовлетворяет классическому уравнению диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c, \quad (4.1)$$

где D — коэффициент диффузии в сильнопроницаемой среде. Уравнение для концентрации в области Π получается из (4.1) заменой D на коэффициент диффузии слабопроницаемой среды d . Между коэффициентами диффузии имеет место соотношение

$$D \gg d. \quad (4.2)$$

Как обычно, на границе двух сред непрерывными являются концентрация и нормальная компонента плотности потока. Будем решать задачу при заданном начальном распределении частиц примеси (при $t = 0$), полагая, что в начальный момент времени все частицы сосредоточены в области I . Для случая, когда область I является односвязной (одиночная трещина), будем рассматривать два варианта геометрии, различающиеся числом измерений l , по которым эта область ограничена (рис. 4.1):

$l = 1$ — плоскопараллельный слой толщиной a ;

$l = 2$ — прямой цилиндр (необязательно круглый) с площадью поперечного сечения $S \sim a^2$.

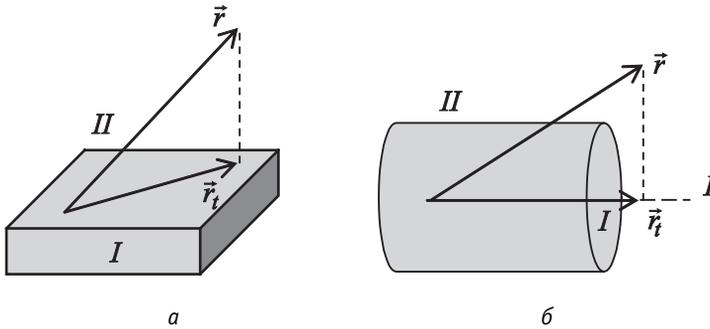


Рис. 4.1. Геометрия задачи:
 $a - l = 1, б - l = 2$

Задача заключается в том, чтобы выяснить зависимость дисперсии примеси $\sigma(t)$ в области I от времени и проанализировать поведение концентрации на больших расстояниях. Величина $\sigma(t)$ определяется равенством

$$\sigma(t) \equiv \langle \bar{r}_t^2 \rangle = \left(\int_{(I)} d^3 r c(\bar{r}, t) \right)^{-1} \int_{(I)} d^3 r \bar{r}_t^2 c(\bar{r}, t), \quad (4.3)$$

где \vec{r}_l — $(3-l)$ -мерный радиус-вектор (l — количество пространственных измерений, по которым область I ограничена). При $l=1$ \vec{r}_l есть проекция трехмерного радиуса-вектора \vec{r} на плоскую границу раздела двух сред, а при $l=2$ — проекция вектора \vec{r} на ось прямого цилиндра. Интегрирование в (4.3) происходит по области I . Здесь и далее предполагается, что начало координат выбрано так, чтобы выполнялось условие

$$\int_{(I)} d^3r \vec{r}_l c(\vec{r}, 0) = 0. \quad (4.4)$$

Отметим, что характер зависимости $\sigma(t)$ определяет режим переноса примеси. На временах, когда размер области локализации в области I $R(t)$ велик по сравнению с первоначальным размером $R_0 = R(0)$, имеет очевидное соотношение, вытекающее из определения дисперсии (4.3):

$$R(t) \sim \sqrt{\sigma(t)}. \quad (4.5)$$

4.2. Качественные оценки дисперсии

Так как за время t частицы в области I диффундируют на расстояние $\sim \sqrt{4Dt}$, то на временах $t \ll t_0$, где

$$t_0 = a^2 / 4D, \quad (4.6)$$

частицы не выходят за пределы этой области. Диффузия тогда происходит так, как если бы область I занимала все бесконечное пространство и являлась трехмерной.

На временах $t \gg t_0$ распределение концентрации в области I становится однородным по одному (для плоскопараллельного слоя) или двум (для цилиндра) направлениям, по которым область ограничена. Если при этом длина диффузии в слабопроницаемой среде мала по сравнению с a , т. е. $t \ll t_1$, где

$$t_1 = a^2 / 4d, \quad (4.7)$$

то бóльшую часть времени частицы проводят внутри области I , так что при этом мы имеем дело с квазидвумерной при $l=1$ или квазиодномерной при $l=2$ диффузией. Дисперсия при этом определяется известным выражением

$$\sigma(t) = 2(3-l)Dt. \quad (4.8)$$

Ситуация существенно меняется на временах $t \gg t_1$, когда доля времени τ из интервала t , проводимая частицей в среде I , становится много меньше единицы. До тех пор пока $\sigma(t)$ растет главным образом благодаря диффузии в среде I (время окончания этого режима будет определено ниже), можно считать, что частицы распространяются по направлениям, вдоль которых среда I бесконечна, только в эти отрезки времени ($\sim t\tau$). τ по порядку величины можно оценить как отношение объемов, занятых частицами в областях I и II :

$$\tau(t) \sim \left(a/\sqrt{dt}\right)^l. \quad (4.9)$$

Оценку для дисперсии будем искать по формуле

$$\sigma(t) \sim D \int_{t_1}^t \tau(t') dt'. \quad (4.10)$$

Подставляя (4.10) в (4.9), находим

$$\sigma(t) \sim D\sqrt{tt_1} \text{ при } l=1, \quad (4.11)$$

$$\sigma(t) \sim Dt_1 \ln \frac{t}{t_1} \text{ при } l=2. \quad (4.12)$$

Эти соотношения справедливы до тех пор, пока определяемая ими дисперсия остается малой в сравнении с величиной дисперсии $\sim dt$, возникающей за счет диффузии в слабопроницаемой среде. Отсюда находим оценку верхних границ t_2 для режимов переноса, определяемых зависимостями (4.11) и (4.12):

$$t_2 \sim t_1 \left(\frac{D}{d}\right)^2 \text{ при } l=1, \quad (4.13)$$

$$t_2 \sim t_1 \frac{D}{d} \ln \frac{D}{d} \text{ при } l=2. \quad (4.14)$$

При $t \gg t_2$ доля времени, проводимая частицами в области I , столь мала, что дисперсия определяется диффузией в слабопроницаемой среде. Тогда имеем

$$\sigma(t) \cong 2(3-l)dt. \quad (4.15)$$

4.3. Количественный анализ дисперсии ³

При выводе результатов, относящихся к временам $t \gg t_0$, когда концентрация в области I однородна по ее поперечному сечению, удобно перейти к представлению Фурье по координате \vec{r}_i и Лапласа по времени:

$$c_{\vec{k}p} = \int_0^{\infty} dt \int d^{(3-l)} \vec{r}_i c(\vec{r}, t) \exp(-i\vec{k}\vec{r}_i - pt). \quad (4.16)$$

Далее частицы примеси, находящиеся в сильнопроницаемой среде (области I), будем называть активными. Дисперсия примеси (4.3), выраженная через представление (4.16), принимает вид

$$\sigma(t) = - \left[\int_{p_s - i\infty}^{p_s + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} c_{0p} \right]^{-1} \int_{p_s - i\infty}^{p_s + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \nabla_{\vec{k}}^2 c_{\vec{k}p} \Big|_{\vec{k}=0}, \quad \text{Re } p_s > 0. \quad (4.17)$$

Здесь, как и в (4.16), концентрация частиц относится к области I .

Проинтегрировав уравнение (4.1) по l координатам внутри области I (по ее поперечному сечению) и перейдя в представление Фурье по координате \vec{r}_i и Лапласа по времени, придем к уравнению

$$(p + Dk^2) S_l c_{\vec{k}p} + q_{\vec{k}p} = N_0, \quad (4.18)$$

где N_0 — полное число частиц; S_l — площадь поперечного сечения области I ($S_l = a$ при $l=1$ и $S_l \sim a^2$ при $l=2$); $q_{\vec{k}p}$ — компонента Фурье—Лапласа плотности потока частиц из области I в область II . Предполагаем, что абсолютная величина вектора \vec{k} удовлетворяет неравенству

$$kR_0 \ll 1, \quad (4.19)$$

где R_0 — размер области локализации частиц по координате \vec{r}_i в начальный момент времени (считаем, что $R_0 < a$).

Чтобы замкнуть задачу о среде I , необходимо установить связь между величинами $q_{\vec{k}p}$ и $c_{\vec{k}p}$. Для этого воспользуемся уравнением диффузии в

³ По материалам [44].

области II , учтя граничные условия непрерывности концентрации и плотности потока. Отдельно рассмотрим случаи $l = 1$ и $l = 2$.

1. $l = 1$. Уравнение диффузии в \bar{k}_p -представлении для концентрации частиц в области II $c_{\bar{k}_p}(z)$ имеет вид

$$\left(p + dk^2 - d \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) c_{\bar{k}_p}(z) = 0, \quad (4.20)$$

где z — координата по нормали к плоскопараллельному слою. Решение уравнения (4.20) для положительных значений координаты z имеет вид

$$c_{\bar{k}_p}(z) = c_{\bar{k}_p} \exp\left\{-z\sqrt{k^2 + p/d}\right\}. \quad (4.21)$$

В этой формуле начало отсчета координаты z выбрано на границе между областями I и II и учтено граничное условие

$$c_{\bar{k}_p}(0) = c_{\bar{k}_p}. \quad (4.22)$$

Учитывая наличие двух равноценных частей границы ($z = 0$ и $z = -a$), для суммарной плотности потока имеем из (4.21)

$$q_{\bar{k}_p} = -2d \frac{\partial c_{\bar{k}_p}(z)}{\partial z} \Big|_{z=0} = 2d\sqrt{k^2 + p/d} c_{\bar{k}_p}. \quad (4.23)$$

Выражая с помощью этой зависимости $q_{\bar{k}_p}$ через $c_{\bar{k}_p}$ в уравнении (4.18), находим компоненту Фурье—Лапласа концентрации частиц в области I :

$$c_{\bar{k}_p} = \frac{N_0/a}{p + Dk^2 + \sqrt{\frac{p + dk^2}{t_1}}}, \quad (4.24)$$

где t_1 — характерное время, определенное формулой (4.7).

Подстановка (4.24) в (4.17) дает

$$\sigma(t) = 2 \left[\int_{p_0 - i\infty}^{p_0 + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{1}{p + \sqrt{\frac{p}{t_1}}} \right]^{-1} \int_{p_0 - i\infty}^{p_0 + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{2D + \frac{d}{\sqrt{pt_1}}}{\left(p + \sqrt{\frac{p}{t_1}} \right)^2}, \quad \text{Re } p_0 > 0. \quad (4.25)$$

Отсюда после интегрирования получается выражение для дисперсии на временах, больших по сравнению с t_1 :

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= 4Dt \quad \text{при } t_0 \ll t \ll t_1, \\ \sigma(t) &= 4 \left(D\sqrt{\pi t t_1} + dt \right) \quad \text{при } t \gg t_1. \end{aligned} \quad (4.26)$$

2. $l = 2$. В представлении Фурье—Лапласа уравнение диффузии в области II имеет вид

$$(p + dk^2 - d\Delta_{\bar{\rho}}) c_{\bar{k}\rho}(\bar{\rho}) = 0, \quad (4.27)$$

где $\bar{\rho}$ — двумерная координата в плоскости, нормальной к оси прямого цилиндра.

Фурье—Лаплас-компонента отнесенного к единице длины потока $q_{\bar{k}\rho}$ дается интегралом по контуру поперечного сечения цилиндра U :

$$q_{\bar{k}\rho} = -d \oint_U du (\bar{s} \nabla_{\bar{\rho}}) c_{\bar{k}\rho}(\bar{\rho}), \quad (4.28)$$

где du — элемент длины контура; \bar{s} — единичный вектор внешней нормали к линии контура в плоскости поперечного сечения.

Как и при выводе второй формулы из (4.26), будем рассматривать времена $t \gg t_1$. Поскольку главный вклад во встречающиеся в этом разделе интегралы обратного преобразования Лапласа дает область $p \sim t^{-1}$, имеет место неравенство

$$pt_1 \ll 1. \quad (4.29)$$

Время t_1 определено формулой (4.7). Так как при $l = 2$ $a \sim \sqrt{S_l}$, определим $a = \sqrt{S_2 / \pi}$. Тогда имеем

$$t_1 = \frac{S_2}{4\pi d}. \quad (4.30)$$

Для дальнейшего вывода удобно ввести в плоскости поперечного сечения цилиндра окружность O радиуса ρ_0 , охватывающую цилиндр так, чтобы площадь соответствующего круга была минимальной. Очевидно, что

$$\rho_0 \sim \sqrt{\frac{S_2}{\pi}}. \quad (4.31)$$

Далее проинтегрируем уравнение (4.27) по переменной $\bar{\rho}$ по области между контуром поперечного сечения цилиндра и окружностью O (рис. 4.2).

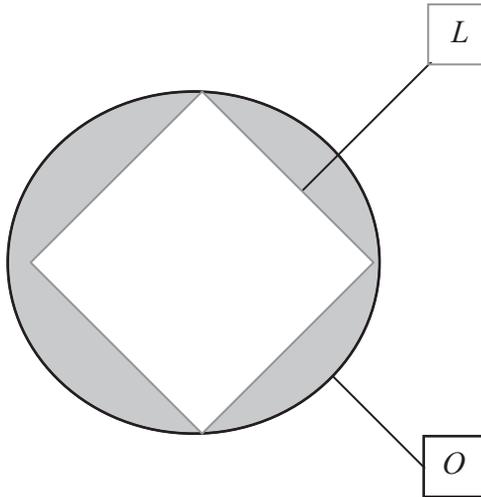


Рис. 4.2. Площадь интегрирования (закрашенная) уравнения (4.27) при выводе формулы (4.32)

Благодаря неравенству (4.29) с учетом (4.31) вкладом двух первых слагаемых в интеграл от уравнения (4.27) следует пренебречь. Тогда, используя теорему Гаусса, получим

$$q_{\bar{k}\bar{p}} \cong -d\rho_0 \int_0^{2\pi} d\phi \left. \frac{\partial c_{\bar{k}\bar{p}}(\bar{\rho})}{\partial \bar{\rho}} \right|_{\bar{\rho}=\rho_0}. \quad (4.32)$$

Функция $c_{\bar{k}\bar{p}}(\bar{\rho})$ может быть разложена в ряд по собственным функциям уравнения (4.27), которые имеют вид

$$K_m \left(\rho \sqrt{k^2 + p/d} \right) \exp(\pm im\varphi),$$

где K_m — функция Макдональда (см. [45]); φ — азимутальный угол в плоскости поперечного сечения. После подстановки ряда в интеграл (4.32) от него останется лишь первый член, который в силу граничного условия непрерывности концентрации имеет вид

$$c_{kp}^{(1)}(\vec{\rho}) = c_{kp} \frac{K_0 \left(\rho \sqrt{k^2 + p/d} \right)}{K_0 \left(\rho_o \sqrt{k^2 + p/d} \right)} \quad (4.33)$$

с предельным видом функции Макдональда нулевого порядка [45] при малых значениях аргумента

$$K_0(u) \cong -\ln u \quad \text{при } u \ll 1.$$

После подстановки получившегося выражения в (4.32) находим плотность потока частиц через границу между областями I и II:

$$q_{kp} \cong - \frac{4\pi d c_{kp}}{\ln \left(\frac{H}{(p + dk^2)t_1} \right)}, \quad (4.34)$$

где константа $H = S_2 / \pi \rho_0^2 \sim 1$ зависит от формы поперечного сечения прямого цилиндра. В (4.34) и далее для случая $l = 2$ подразумевается логарифмическая точность. Иными словами, аргумент логарифма определен с точностью до неизвестного численного множителя H порядка единицы. Исключив величину q_{kp} с помощью (4.34) из (4.18) и снова воспользовавшись неравенством (4.29), приходим к выражению для концентрации в области I:

$$c_{kp} = \frac{N_0 / S_2}{p + Dk^2 + \left[t_1 \ln \left(\frac{H}{(p + dk^2)t_1} \right) \right]^{-1}}. \quad (4.35)$$

Подстановка этой формулы в (4.17) дает

$$\sigma(t) = -2 \frac{\int_{p_*-i\infty}^{p_*+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp(pt) \left\{ Dt_1 \ln^2(pt_1) + \frac{d}{p} \right\}}{\int_{p_*-i\infty}^{p_*+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp(pt) \ln(pt_1)}, \quad \text{Re } p_* > 0. \quad (4.36)$$

Вычисление интегралов приводит к окончательному выражению для дисперсии, справедливому на больших по сравнению с t_1 временах:

$$\sigma(t) = 4Dt_1 \ln \frac{t}{t_1} + 2dt \quad \text{при } t \gg t_1. \quad (4.37)$$

В интервалах времени $t_1 \ll t \ll t_2$ и $t \gg t_2$, где t_2 определено в (4.13) и (4.14), формулы (4.26) и (4.36) подтверждают оценки дисперсии (4.11), (4.12), полученные качественными оценками. Сами же формулы (4.26) и (4.36) остаются справедливыми и в переходной области, т. е. при $t \sim t_2$.

Учитывая (4.5), формулам (4.11) и (4.12) можно придать еще один вид:

$$\begin{aligned} R(t) &\propto t^{1/4}, \quad l=1 \\ R(t) &\propto \ln^{1/2} \left(\frac{t}{t_1} \right), \quad l=2 \quad \text{при } t_1 \ll t \ll t_2. \end{aligned} \quad (4.38)$$

Таким образом, в модели Дыхне имеет место промежуточный интервал времени $t_1 \ll t \ll t_2$, в котором перенос примеси является неклассическим. В обоих вариантах геометрии области I (плоскопараллельного слоя или прямого цилиндра) он соответствует субдиффузии. При $l=1$ это степенная субдиффузия, при $l=2$ — логарифмическая. В этом интервале показатель в зависимости $R(t) \propto t^\gamma$ принимает значения

$$\begin{aligned} \gamma &= 1/4 \quad \text{при } l=1, \\ \gamma &\rightarrow 0 \quad \text{при } l=2. \end{aligned}$$

С учетом поведения концентрации при $t \ll t_1$ легко подобрать интерполяционные формулы, описывающие поведение дисперсии при $t \gg t_0$:

$$\sigma(t) = 2\pi Dt_1 \left(\sqrt{1 + \frac{4t}{\pi t_1}} - 1 \right) + 4dt \quad \text{при } l=1, \quad (4.39)$$

$$\sigma(t) = 4Dt_1 \ln \left(1 + \frac{t}{2t_1} \right) + 2dt \quad \text{при } l=2.$$

Зависимость дисперсии примеси от времени в двух типах геометрии рассматриваемой модели изображена на рис. 4.3.

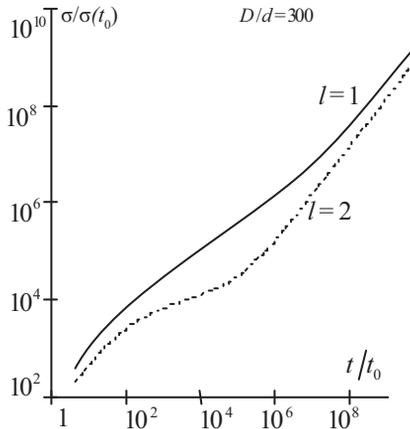


Рис. 4.3. Зависимость дисперсии от времени в задаче Дыхне об одиночной трещине

Картина смены режимов переноса может быть еще более сложной, если область I имеет форму прямого цилиндра с сильно анизотропным сечением. Например, если сечение — прямоугольник со сторонами a и b , удовлетворяющими условию

$$a\sqrt{\frac{d}{D}} \ll b \ll a,$$

то имеют место следующие режимы:

1) $t_0 \ll t \ll t_{1b}$:

$$R(t) \sim \sqrt{Dt} \quad \text{— быстрая классическая диффузия;}$$

2) $t_{1b} \ll t \ll t_{1a}$:

$R(t) \sim (D\sqrt{tt_b})^{1/4}$ — степенная субдиффузия с показателем $\gamma = 1/4$;

3) $t_{1a} \ll t \ll t_{2a}$:

$R(t) = \left(D\sqrt{t_a t_b} \ln \frac{t}{t_a} \right)^{1/2}$ — логарифмическая субдиффузия;

4) $t \gg t_{2a}$:

$R(t) \sim \sqrt{dt}$ — медленная классическая диффузия.

Здесь использованы обозначения:

$$t_{1a} = \frac{a^2}{4d}, \quad t_{1b} = \frac{b^2}{4d}, \quad t_{2a} = t_{1a} (D/a) \ln(D/a).$$

Отметим, что в реальных ситуациях отношение коэффициентов диффузии двух сред D/d может быть достаточно большим, чтобы время t_2 оказалось практически недостижимым, и тогда субдиффузия будет играть роль асимптотического режима, как это происходит в нерегулярных средах.

4.4. Асимптотики концентрации ⁴

В этом подразделе проанализируем поведение концентрации примеси на больших расстояниях от источника и на расстояниях много больше размера основной области распределения $R(t)$. Также рассмотрим зависимость от времени полного числа активных частиц $N(t)$ (сосредоточенных в области I). Отдельно проведем вывод для случаев $l=1$ и $l=2$.

Трещина в форме плоскопараллельного слоя, $l=1$. Применяя к соотношению (4.24) операцию обратного преобразования Фурье—Лапласа, получим общее выражение для распределения концентрации активных частиц примеси в зависимости от координат и времени:

$$c(\vec{r}, t) = \frac{N_0}{a} \int_{p_* - i\infty}^{p_* + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} \frac{\exp(i\vec{k}\vec{x} + pt)}{p + Dk^2 + \sqrt{\frac{p + dk^2}{t_1}}}, \quad \text{Re } p_* > 0. \quad (4.40)$$

Отсюда после интегрирования по координатам в плоскости

⁴ По материалам [46; 47].

$$N(t) = N_0 \int_{p_* - i\infty}^{p_* + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{e^{pt}}{p + \sqrt{\frac{p}{t_1}}}, \quad \text{Re } p_* > 0. \quad (4.41)$$

Для дальнейшего анализа воспользуемся двумя довольно очевидными утверждениями. Первое касается интервалов интегрирования в (4.40) по переменной k при фиксированном значении p . Они удовлетворяют неравенствам

$$dk^2 \ll p \quad \text{при } p \gg t_2^{-1}, \quad (4.42)$$

$$p + Dk^2 \ll \sqrt{\frac{p + dk^2}{t_1}} \quad \text{при } p \ll t_2^{-1}, \quad (4.43)$$

где

$$t_2 = t_1 \left(\frac{D}{d} \right)^2. \quad (4.44)$$

Второе утверждение состоит в том, что интервалы интегрирования по переменной p в уравнениях (4.40) и (4.41) суть

$$p \leq t^{-1} \quad \text{в (4.40) и (4.41) при } x \leq R(t), \quad (4.45)$$

$$p \gg t^{-1} \quad \text{в (4.40) при } x \gg R(t). \quad (4.46)$$

Теперь рассмотрим поведение концентрации активных частиц на временах $t \ll t_2$. С учетом соотношений (4.42)—(4.46) из (4.40) получаем

$$p(\vec{r}, t) \cong \frac{N_0}{2\pi a D} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} e^{st} K_0 \left(x \sqrt{\frac{p + \sqrt{p/t_1}}{D}} \right), \quad t \ll t_2, \quad (4.47)$$

где $K_0(z)$ — функция Макдональда; $x = |\vec{x}|$.

Для значений $p \gg t_1^{-1}$ членом $\sqrt{p/t_1}$ в аргументе (4.47) можно пренебречь. Тогда после выполнения интегрирования приходим к выражению

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_0}{4\pi a D t} \exp \left(-\frac{x^2}{4Dt} \right), \quad t_0 \ll t \ll t_1, \quad (4.48)$$

которое соответствует тому очевидному факту, что на временах $t_0 \ll t \ll t_1$ перенос примеси в среде I происходит в режиме быстрой (с коэффициентом D) двумерной классической диффузии. На рис. 4.4а схематически изображено сечение облака примеси по нормали к границе слоя.

Рассмотрим поведение концентрации на временах $t_1 \ll t \ll t_2$. Согласно (4.45) аргумент функции K_0 в (4.47) в области основного облака частиц ($x \lesssim R(t)$) аппроксимируется выражением $x(s/D^2t_1)^{1/4}$. Поэтому имеем

$$c(\vec{r}, t) = \frac{N_0}{8\pi aDt} F(\eta), \quad \eta = \frac{x^2}{4D\sqrt{tt_1}} \text{ при } \eta \lesssim 1, \quad (4.49)$$

где

$$F(\eta) = 4 \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{du}{2\pi i} e^u K_0(2\eta^{1/2}u^{1/4}). \quad (4.50)$$

Так как $K_0(z) \cong -\ln z$ при $|z| \ll 1$, из (4.50) находим $F(0) = 1$. В результате из (4.49) следует

$$n(0, t) = \frac{N_0}{8\pi aDt}. \quad (4.51)$$

Из выражений (4.49) и (4.50) вытекает оценка для размера основного облака частиц примеси:

$$R(t) \sim (4D\sqrt{tt_1})^{1/2} \text{ при } t_1 \ll t \ll t_2, \quad (4.52)$$

указывающая на субдиффузионный режим переноса в этом временном диапазоне. Отметим, что (4.52) совпадает со среднеквадратичным смещением частиц, полученным в подразделе 2.3. Сечение облака примеси по нормали к границе слоя в интервале $t_1 \ll t \ll t_2$ схематически изображено на рис. 4.4б.

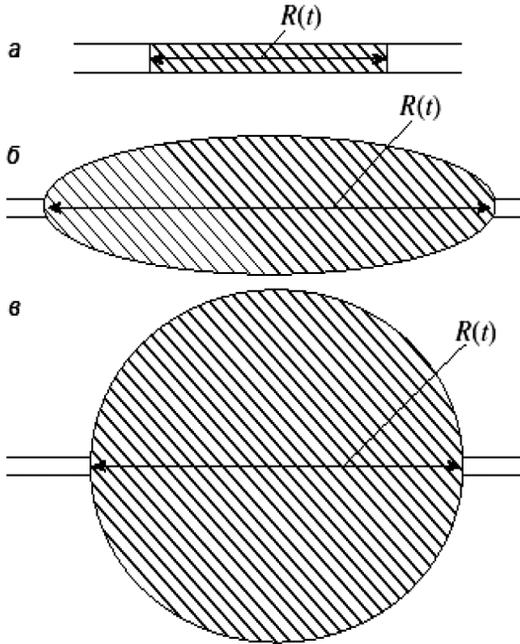


Рис. 4.4. Сечение облака примеси по нормали к плоскости слоя ($l = 1$) либо вдоль оси цилиндра ($l = 2$) для разных интервалов времени: *а* — быстрая классическая диффузия, *б* — субдиффузия, *в* — медленная классическая диффузия

Выражение для концентрации в пределе $x \gg R(t)$ при $t_1 \ll t \ll t_2$ находится из (4.47) путем использования соотношения $K_0(z)|_{z \gg 1} \cong \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z}$. Применяя далее метод стационарной фазы, получаем следующие асимптотические выражения:

$$c(r, t) \cong \frac{N_0}{2\sqrt{6} \pi a D t} \exp \left\{ -3 \left(\frac{\eta}{4} \right)^{2/3} \right\}, \quad (4.53)$$

$$1 \ll \eta \ll 4 \left(\frac{t}{t_1} \right)^{3/2}$$

и

$$c(r, t) \cong \frac{N_0}{4\pi aDt} \exp\left\{-\eta\sqrt{\frac{t_1}{t}}\right\} = \frac{N_0}{4\pi aDt} \exp\left\{-\frac{x^2}{4Dt}\right\}, \quad (4.54)$$

$$\eta \gg 4\left(\frac{t}{t_1}\right)^{3/2}.$$

Таким образом, видно, что при $t_1 \ll t \ll t_2$ асимптотика профиля концентрации на больших расстояниях состоит из двух частей. При этом более удаленная часть (4.54) совпадает с выражением для концентрации на малых временах (4.48).

Перейдем теперь к анализу поведения концентрации на больших временах $t \gg t_2$. Согласно (4.43) и (4.45) на этих временах при $x \leq R(t)$ последний член в знаменателе выражения (4.40) оказывается доминирующим. Тогда из (4.40) следует выражение

$$c(r, t) = \frac{N_0}{4\pi a dt} \sqrt{\frac{t_1}{\pi t}} \exp(-\xi) \cong \frac{N_0}{(4\pi dt)^{3/2}} \exp(-\xi), \quad \xi = \frac{x^2}{4dt}, \quad \xi \leq 1, \quad (4.55)$$

что соответствует режиму медленной (с коэффициентом диффузии d) классической трехмерной диффузии (см. рис. 4.4в). Характерные значения переменной Лапласа, приводящие к выражению (4.55), имеют порядок ξ/t . Поэтому формула (4.55) справедлива при $\xi \ll t/t_2$ и наряду с основным облаком описывает также ближнюю часть хвоста концентрации при условии $1 \ll \xi \ll t/t_2$. Если $\xi \gg t/t_2$ при $t \gg t_2$, то в соответствии с (4.42) под корнем в знаменателе (4.40) следует пренебречь слагаемым dk^2 . В результате возвращаемся к выражениям (4.53) и (4.54), в которых должна быть сделана следующая подстановка:

$$\eta = \xi \sqrt{\frac{t}{t_2}}. \quad (4.56)$$

Таким образом, хвост концентрации на временах $t \gg t_2$ состоит из трех различных по структуре частей, описываемых выражениями (4.55), (4.53) и (4.54).

Отсюда следует, что чем дальше от источника расположена рассматриваемая часть хвоста, тем более ранний по времени режим переноса определяет ее форму.

Рассмотрим зависимость от времени полного числа частиц. Для нее из (4.41) следуют простые выражения в двух предельных случаях:

$$\begin{aligned} N(t) &\cong N_0, \quad t \ll t_1; \\ N(t) &\cong N_0 \sqrt{\frac{t_1}{\pi t}}, \quad t \gg t_1. \end{aligned} \quad (4.57)$$

В завершение раздела оценим величину Δ — глубину проникновения частиц в среду II. Из формулы (4.21) следует, что $\Delta \sim \sqrt{d/p_*}$, где p_* — характерная величина переменной p , дающая основной вклад при обратном преобразовании Лапласа. Из (4.45) и (4.46) следует, что $p_* \sim t^{-1}$ в области переменной \bar{x} , соответствующей основному облаку частиц в среде I, и $p_* \sim |\Gamma|t^{-1}$ для значений \bar{x} в хвостах профиля концентрации. Здесь Γ — показатель экспоненты, определяющей концентрацию в области $x \gg R(t)$. Например, при $t_1 \ll t \ll t_2$ из (4.53) следует, что

$$|\Gamma| = 3 \left(\frac{\eta}{4} \right)^{2/3} \quad \text{в интервале } 1 \ll \eta \ll 4 \left(\frac{t}{t_1} \right)^{3/2}, \quad \text{а из (4.54) } |\Gamma| = \eta \sqrt{\frac{t_1}{t}} \quad \text{в интервале } \eta \gg 4 \left(\frac{t}{t_1} \right)^{3/2}.$$

Поэтому имеем следующие оценки для глубины проникновения:

$$\Delta \sim \sqrt{dt}, \quad x \lesssim R(t), \quad (4.58)$$

$$\Delta \sim \sqrt{\frac{dt}{\Gamma}}, \quad x \gg R(t). \quad (4.59)$$

Трещина в форме прямого цилиндра, $l = 2$. В этой геометрии подобно (4.48) на временах $t_0 \ll t \ll t_1$ ($t_0 = S_2 / 4\pi D$), когда концентрация по сечению цилиндра уже является однородной, но проникновение примеси в матрицу еще незначительно, устанавливается режим быстрой классической одномерной диффузии, и для концентрации и полного числа активных частиц получаются выражения

$$c(x, t) \cong \frac{N_0}{S_2 \sqrt{4\pi Dt}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Dt}\right), \quad (4.60)$$

$$N(t) \cong N_0.$$

Путем применения к соотношению (4.35) операции обратного преобразования Фурье—Лапласа находим выражение для распределения концентрации активных частиц примеси в зависимости от координат и времени при $t \gg t_1$:

$$c(x, t) = \frac{N_0}{S} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{\exp(ikx + pt)}{p + Dk^2 + \left[t_1 \ln \left(\frac{H}{(p + dk^2) t_1} \right) \right]^{-1}}. \quad (4.61)$$

Отсюда после интегрирования по координате x получается формула для полного числа активных частиц:

$$N(t) \cong N_0 t_1 \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \ln \left(\frac{H}{pt_1} \right) = N_0 \frac{t_1}{t}, \quad t \gg t_1. \quad (4.62)$$

Как и в случае $l = 1$, для анализа (4.61) важны неравенства (4.42)—(4.46), но с двумя оговорками. Теперь величина t_2 определяется следующим образом:

$$t_2 = t_1 \frac{D}{d} \ln \left(\frac{D}{d} \right), \quad (4.63)$$

а соотношение (4.43) следует заменить на

$$p + Dk^2 \ll \frac{1}{t_1 \ln \left(\frac{H}{pt_1} \right)} \quad \text{при} \quad p \ll t_2^{-1}. \quad (4.64)$$

Рассмотрим поведение концентрации на временах $t_1 \ll t \ll t_2$. Пренебрегая величиной dk^2 в подынтегральном выражении (4.53) и выполняя интегрирование по k, p , получаем

$$c(x, t) = \frac{N_0}{S} \frac{t_1}{4t \sqrt{Dt_1 \ln(t/t_1)}} (1 + \zeta) \exp(-\zeta) \quad \text{при} \quad \zeta \ll \frac{t}{t_1}. \quad (4.65)$$

$$\zeta \equiv \frac{|x|}{\sqrt{Dt_1 \ln(t/t_1)}}$$

Отсюда следует выражение для размера облака частиц:

$$R(t) \sim \sqrt{Dt_1 \ln(t/t_1)} \text{ при } t_1 \ll t \ll t_2, \quad (4.66)$$

которое согласуется с выражением для дисперсии частиц, найденным в подразделе 2.3.

Отметим, что формула (4.66) определяет концентрацию частиц не только в основном облаке, но и в ближней части хвоста концентрации, когда $1 \ll \zeta \ll 2t/t_1$. Удаленная часть хвоста, соответствующая $\zeta \ll 2t/t_1$, подобно случаю $l = 1$ (см. (4.54)) описывается гауссовой функцией, соответствующей теперь быстрой одномерной классической диффузии (см. (4.60)). Таким образом, в случае прямого цилиндра дальняя асимптотика профиля концентрации при $t_1 \ll t \ll t_2$, как и в случае плоскопараллельного слоя, состоит из двух частей.

На больших временах, когда $t \gg t_2$, в знаменателе (4.61) последнее слагаемое преобладает над первыми двумя, и после интегрирования приходим к формуле (4.55), описывающей концентрацию частиц в основном облаке и ближней части хвоста при условии

$$\xi \equiv (x^2 / 4dt) \ll t / t_2. \quad (4.67)$$

В диапазоне

$$t / t_2 \ll \xi \ll \frac{Dt}{dt_1} \ln \left(\frac{t}{t_1} \right) \quad (4.68)$$

асимптотическое выражение получается из (4.65) путем замены

$$\zeta = 2 \sqrt{\xi \frac{dt}{Dt_1 \ln(t/t_1)}}. \quad (4.69)$$

При условии

$$\xi \gg \frac{Dt}{dt_1} \ln \left(\frac{t}{t_1} \right) \quad (4.70)$$

приходим к самой дальней асимптотике, соответствующей гауссовому выражению (см. (4.60)) для одномерной диффузии на самых ранних временах. Таким образом, хвост концентрационного профиля на временах $t \gg t_2$, как и в случае $l = 1$, состоит из трех различных частей.

Видно, что, как и в случае плоскопараллельного слоя, чем дальше от источника расположена рассматриваемая часть хвоста, тем более ранний

режим переноса определяет ее форму. Многокаскадная структура концентрационных хвостов в модели Дыхне изображена на рис. 4.5.

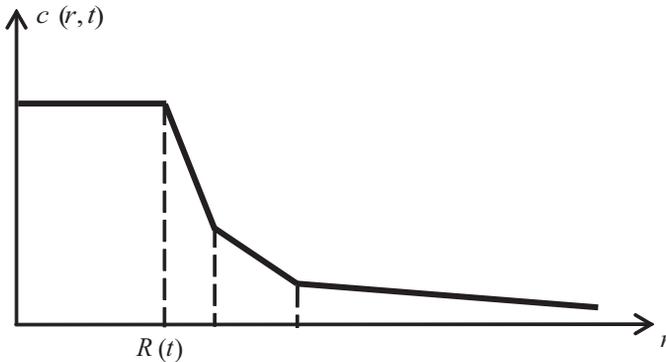


Рис. 4.5. Многокаскадная структура асимптотики концентрации на далеких расстояниях при $t \gg t_2$

В заключение раздела отметим, что глубина проникновения частиц в среду Π для рассматриваемого здесь случая $l = 2$ определяется оценками (4.58) и (4.59), где значение показателя Γ следует брать из формул данного раздела. Например, при $t \gg t_2$ в интервале (4.68) Γ определяется формулами (4.69) и (4.65), а в интервале (4.70) — показателем экспоненты в первой формуле (4.60).

4.5. Системы трещин

Рассмотрим теперь вариант модели Дыхне, в которой сильнопроницаемая среда занимает многосвязную область I и соответствует периодической системе M параллельных друг другу одинаковых плоскопараллельных слоев ($l = 1$) либо прямых цилиндров ($l = 2$) (для краткости и те и другие будем называть трещинами). Как и ранее, толщину слоя будем обозначать a , площадь поперечного сечения цилиндра — $S \sim a^2$. Расстояние между трещинами b считается большим в сравнении с их поперечным размером:

$$b \gg a. \tag{4.71}$$

Как и прежде, будем считать, что примесь изначально сосредоточена в одной из трещин. Назовем ее основной и выберем в ней начало координат, причем так, чтобы выполнялось условие (4.4). Дисперсия по-прежнему определена

равенством (4.3), в котором интегрирование происходит по объему основной трещины. Анализ проведем на качественном уровне.

Оценку для дисперсии будем искать по формуле

$$\sigma(t) \sim \int_0^t D_{\text{ef}}(t') dt', \quad (4.72)$$

где $D_{\text{ef}}(t)$ — средневзвешенное значение коэффициента диффузии по области локализации примеси в момент времени t :

$$D_{\text{ef}}(t) \sim \frac{DA_I(t) + dA_{II}(t)}{A_I(t) + A_{II}(t)}. \quad (4.73)$$

Здесь D и d — коэффициенты диффузии соответственно сильно- и слабопроницаемой среды; $A_I(t)$ и $A_{II}(t)$ — парциальные объемы, приходящиеся соответственно на сильно- и слабопроницаемую среды в области локализации примеси на момент времени t в пространстве l измерений, по которым сильнопроницаемая среда имеет ограничения.

Для рассмотренного в предыдущих разделах случая одиночной трещины при $t \gg t_0$ имеем

$$\begin{aligned} A_I &= a, \quad A_{II} \sim \sqrt{4dt} \quad \text{при } l=1 \quad (M=1). \\ A_I &= S, \quad A_{II} \sim 4dt \quad \text{при } l=2 \end{aligned} \quad (4.74)$$

Легко проверить, что подстановкой (4.74) в (4.73), а затем (4.73) в (4.72) получаются все результаты подраздела 4.2 для одиночной трещины. При этом условная граница между режимами быстрой классической диффузии и субдиффузии t_1 соответствует моменту, когда второе слагаемое в знаменателе формулы (4.73) сравнивается с первым; при этом второе слагаемое в числителе (4.73) остается много меньше первого. Граница же между режимами субдиффузии и медленной классической диффузии t_2 соответствует моменту, когда вклад в интеграл (4.72), возникающий от второго слагаемого в числителе (4.73), сравнивается с вкладом от первого. Отметим, что из-за выполнения неравенства (4.71) величина $A_{II}(t)$ определяется (4.74) независимо от количества трещин.

При переходе от одиночной трещины к системе трещин существенны два соображения. Первое: поскольку диффузия по слабопроницаемой среде между основной и ближайшей к ней трещиной занимает время

$$t_b = \frac{b^2}{4d}, \quad (4.75)$$

на временах $t \ll t_b$ присутствие всех остальных (помимо основной) трещин на переносе не сказывается. Второе соображение: в задаче об одиночной трещине на временах $t \gg t_2$ (t_2 определено формулами (4.13) и (4.14)) величина дисперсии определяется исключительно слабопроницаемой средой. Сопоставляя их, приходим к выводу, что при $t_b \gg t_2$ дисперсия частиц в задачах о системе трещин совпадает с найденной в предыдущих разделах соответствующей дисперсией в случае единственной трещины. Иначе говоря, при выполнении неравенства $t_b \gg t_2$ присутствие всех других трещин, кроме основной, на переносе примеси не сказывается. Поэтому далее, рассматривая случай $M \geq 2$, будем считать, что выполняется обратное неравенство

$$t_b \ll t_2. \quad (4.76)$$

Случай двух трещин: $M = 2$. Заметим, что благодаря (4.71) между характерными временами t_b и t_1 (см. (4.7)) справедливо неравенство

$$t_1 \ll t_b. \quad (4.77)$$

Поэтому при $t \ll t_1$ перенос идет в режиме быстрой классической диффузии, а в интервале между t_1 и t_b реализуется режим субдиффузии, соответствующий одиночной трещине:

$$\sigma^{(2)}(t) = \sigma(t) \text{ при } t_1 \ll t \ll t_b. \quad (4.78)$$

Здесь и далее номер в верхнем индексе будет обозначать количество трещин, к которому относится рассматриваемый случай. Величины без верхнего индекса относятся к одиночной трещине. Так, $\sigma(t)$ есть дисперсия в задаче об одиночной трещине (см. (4.11) и (4.12)).

На временах $t \sim t_b$ в процесс переноса вовлекается вторая трещина, и дисперсия приобретает дополнительный коэффициент 2:

$$\sigma^{(2)}(t) = 2\sigma(t) \text{ при } t_b \ll t \ll t_2. \quad (4.79)$$

На временах $t \gg t_2$ перенос идет в режиме медленной классической диффузии с дисперсией, определенной формулой (4.15).

Случай переноса в регулярно-неоднородной среде с большим количеством трещин: $M \gg 1$. На временах $t \leq t_b$ помимо основной трещины в процессе переноса участвуют только соседние с ней. Поэтому качественно дисперсия ведет здесь себя так же, как на соответствующих временах в рассмотренном только что случае двух трещин. Следовательно, далее мы можем сосредоточиться на временах $t \gg t_b$. Анализ удобно провести отдельно для системы плоскопараллельных пластин ($l = 1$) и прямых цилиндров ($l = 2$).

1. $M \gg 1$, $t \gg t_b$, $l = 1$. Парциальный объем сильнопроницаемой среды при $t \gg t_b$ можно записать в виде

$$A_l(t) = a m(t), \quad (4.80)$$

где $m(t)$ — количество трещин, вовлеченных в процесс переноса к моменту t . Далее для краткости будем называть $m(t)$ числом активных трещин. Подставляя (4.80) в (4.73), а затем (4.73) в (4.72), получаем выражение для дисперсии при $t \gg t_b$:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \int \left(\frac{Da m(t')}{\sqrt{4dt'}} + d \right) dt'. \quad (4.81)$$

Число активных трещин дается очевидными оценками

$$\begin{aligned} m(t) &\sim \frac{\sqrt{4dt}}{b} \quad \text{при } t < M^2 t_b, \\ m(t) &= M \quad \text{при } t > M^2 t_b. \end{aligned} \quad (4.82)$$

После подстановки (4.82) в (4.81) приходим к заключению о наличии трех последовательно сменяющих друг друга режимов переноса примеси. В каком режиме протекает процесс, зависит от того, какой из членов в скобках под интегралом в (4.81) доминирует и каким из выражений (4.82) определяется величина $m(t)$.

Первый режим реализуется, когда число активных трещин растёт, оставаясь меньше максимального значения M :

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \left(\frac{a}{b} \right) Dt \quad \text{при } t_b \ll t \ll M^2 t_b. \quad (4.83)$$

Это режим ослабленной классической диффузии с эффективным коэффициентом $D_{ef} = (a/b)D$, удовлетворяющим неравенству

$$d \ll D_{ef} \ll D. \quad (4.84)$$

Второй режим протекает, когда число активных трещин достигло максимального, а вклад слабопроницаемой среды в величину дисперсии (см. второе слагаемое в скобках в (4.81)) по-прежнему остается пренебрежимо малым:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim MD\sqrt{tt_1} \text{ при } M^2t_b \ll t \ll M^2t_2. \quad (4.85)$$

Этот режим соответствует усиленной (множитель M) степенной субдиффузии. Наконец, третий, самый поздний режим наступает, когда вклад слабопроницаемой среды становится преобладающим:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim dt \text{ при } t \gg M^2t_2. \quad (4.86)$$

Это режим медленной классической диффузии.

2. $M \gg 1$, $t \gg t_b$, $l=2$. В связи с тем что при $l=2$ теперь $A_{II} \sim 4dt$, формула (4.81) модифицируется следующим образом:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \int \left(\frac{DSm(t')}{4dt} + d \right) dt'. \quad (4.87)$$

Рассмотрим отдельно две конфигурации периодической системы M параллельных друг другу цилиндрических трещин. Первая из них соответствует линейной цепочке цилиндров, когда их оси лежат в одной плоскости (рис. 4.6), а вторая — объемной периодической системе цилиндрических трещин (рис. 4.7).



Рис. 4.6. Поперечное сечение плоской системы цилиндрических трещин

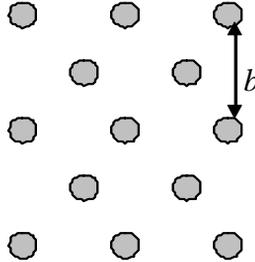


Рис. 4.7. Поперечное сечение объемной системы трещин

Плоская периодическая цепочка M трещин. Число активных трещин для этой конфигурации, как и в случае $l = 1$, описывается (4.82). Подставляя (4.82) в (4.87) и действуя, как при $l = 1$, находим режимы переноса. Их систематика зависит от соотношения между двумя характерными временами t_2 и Mt_b .

Если

$$t_2 \gg Mt_b, \quad (4.88)$$

реализуются три режима.

Сначала это ослабленный (множитель \sqrt{S}/b) степенной субдиффузионный режим:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \frac{\sqrt{S}}{b} D \sqrt{tt_1} \quad \text{при } t_b \ll t \ll M^2 t_b, \quad (4.89)$$

затем усиленный (множитель M) логарифмический субдиффузионный режим:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim MDt_1 \ln \frac{t}{t_b} \quad \text{при } M^2 t_b \ll t \ll Mt_2. \quad (4.90)$$

Наконец, последним реализуется режим медленной классической диффузии:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim dt \quad \text{при } t \gg Mt_2. \quad (4.91)$$

Если же, наоборот,

$$t_2 \ll Mt_b, \quad (4.92)$$

то при $t > t_b$ режимов всего два — ослабленный степенной (субдиффузионный) и режим медленной классической диффузии:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \frac{\sqrt{S}}{b} D \sqrt{t t_1} \quad \text{при } t_b \ll t \ll t_2^2 / t_b, \quad (4.93)$$

$$\sigma^{(M)}(t) \sim dt \quad \text{при } t \gg t_2^2 / t_b. \quad (4.94)$$

Объемная периодическая система M трещин. Число активных трещин для этой конфигурации дается оценками

$$m_i \sim \frac{4dt}{b^2} \quad \text{при } t < Mt_b, \quad (4.95)$$

$$m_i = M \quad \text{при } t > Mt_b.$$

Поступая, как в предыдущих случаях, находим три режима: ослабленная (множитель S/b^2) классическая диффузия:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \frac{S}{b^2} Dt \quad \text{при } t_b \ll t \ll Mt_b, \quad (4.96)$$

усиленная (множитель M) логарифмическая субдиффузия:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim MDt_1 \ln \left(\frac{t}{Mt_b} \right) \quad \text{при } Mt_b \ll t \ll Mt_2, \quad (4.97)$$

медленная классическая диффузия:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim dt \quad \text{при } t \gg Mt_2. \quad (4.98)$$

4.6. Выводы

Исследование переноса примеси в регулярно неоднородной, сильноконтрастной среде показало, что смена режимов переноса с увеличением времени (быстрая классическая диффузия, субдиффузия, медленная классическая диффузия) приводит к сложной структуре асимптотики профиля концентрации на больших расстояниях (в хвостах). Хвост в субдиффузионном режиме состоит из двух различных частей, а в режиме медленной классической диффузии — из трех. Установлено, что чем более удален фрагмент хвоста от места, где находилась примесь в начальный момент, тем более ранний режим переноса определяет его форму. Полное число активных частиц (локализованных в среде с высокой проницаемостью) уменьшается во времени со скоростью, зависящей от геометрии среды:

обратно пропорционально корню из времени для плоскопараллельного слоя и первой степени времени для прямого цилиндра.

Глубина проникновения частиц в слабопроницаемую среду имеет обычную классическую диффузионную величину в области основного облака частиц и существенно подавляется в области хвостов.

Решение задачи Дыхне о переносе примеси в периодической системе трещин имеет следующие особенности. Если расстояние между трещинами b таково, что переход к режиму медленной (определяемой свойствами матрицы) классической диффузии произойдет раньше, чем область локализации примеси достигнет соседней трещины ($t_2 \ll t_b$), то перенос происходит, как у одиночной трещины. В противоположном случае ($t_2 \gg t_b$) влияние трещин на перенос примеси коллективизируется, и тогда при конечном числе трещин $M \gg 1$ в дополнение к режиму субдиффузии, который был найден для одиночной трещины, возникают дополнительные промежуточные режимы. Среди них в зависимости от конфигурации и соотношения между параметрами задачи могут быть ослабленная классическая диффузия и усиленная степенная или логарифмическая субдиффузия. Самым поздним режимом, как и для одиночной трещины, является медленная классическая диффузия.

Если количество трещин бесконечно ($M \rightarrow \infty$), то для системы плоскопараллельных слоев и объемной системы прямых цилиндров конечным режимом становится ослабленная присутствием матрицы классическая диффузия. Для плоской же системы прямых цилиндров, как и для $M \neq \infty$, самым поздним режимом является медленная классическая диффузия.

5. Диффузия примеси по перколяционным средам

Как уже отмечалось, ансамбли трещин часто имеют фрактальную структуру. При этом ее размерность близка к размерности перколяционного кластера [48]. Поэтому изучение процессов переноса в перколяционных средах является актуальной задачей.

Результаты, полученные в более ранних исследованиях данной задачи [32; 33; 49], в основном относятся к оценкам среднеквадратичного смещения частиц примеси на больших временах $R(t)$. В то же время вопрос о более детальных характеристиках распределения концентрации примеси, в частности на расстояниях $r \gg R(t)$ (в хвостах распределения), оставался открытым. Для получения таких характеристик требуется уравнение, пригодное для описания эволюции распределения концентрации во времени.

Предлагаемые в литературе уравнения, на наш взгляд, не являются удовлетворительными. Они либо основаны на формализме дробных производных и не подкреплены физическим содержанием [11], либо получены обобщением классического уравнения диффузии с введением зависимости от координат в коэффициенте диффузии [49]. Последнее обстоятельство находится в явном противоречии с тем фактом, что представляющая интерес концентрация примесей является характеристикой, усредненной по ансамблю реализаций сильно неупорядоченной среды.

Цель настоящего раздела состоит в выводе не обладающего отмеченными выше недостатками феноменологического уравнения переноса примеси в перколяционных средах и получении асимптотик для распределения концентрации.

5.1. Структурные особенности перколяционных сред

Напомним кратко существенные для нашего анализа свойства перколяционной среды, сформулированные во введении [32; 33]. Перколяционные среды состоят из не перекрывающихся областей (кластеров), внутри каждой из которых процессы переноса возможны, в то время как переход частиц из одного кластера в другой невозможен. Если среда находится в состоянии выше порога перколяции, в ней имеется бесконечный кластер, и перенос происходит без ограничения по расстоянию. В среде, находящейся ниже порога перколяции, существуют только конечные кластеры, и перенос на большие расстояния затруднен. Ключевая роль в описании перколяционных систем принадлежит корреляционной длине ξ . Для среды, находящейся в состоянии ниже перколяционного порога, распределение кластеров по размерам l соответствует области $l < \xi$, количество кластеров с размерами $l \gg \xi$ экспоненциально мало. При подходе к порогу перколяции корреляционная длина неограниченно возрастает, $\xi \rightarrow \infty$, а выше порога ξ опять становится конечной. При этом распределение конечных кластеров обладает теми же свойствами, что и до порога. Что же касается бесконечного кластера, то на пространственных масштабах $L < \xi$ он обладает фрактальными свойствами и является масштабно инвариантным, а на масштабах $L \gg \xi$ становится статистически однородным. Любой кластер можно разбить на две подобласти: «позвоночный хребет» (backbone — bb) и множество «мертвых концов» (dead ends — de), так что bb связывает удаленные друг от друга части кластера, а de соединяются с bb, каждый в одном месте, оставаясь изолированными друг от друга. Фрактальная размерность подобласти de больше размерности bb. Далее частицы примеси, находящиеся в bb, будем называть активными. Полное число активных

частиц со временем убывает за счет ухода в de , а также локализации в кластерах малых размеров.

5.2. Уравнение переноса

С учетом сказанного запишем уравнение для концентрации активных частиц, усредненной по ансамблю реализаций среды, в следующем виде:

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} + Q + \text{div } \vec{q} = 0. \quad (5.1)$$

Здесь

$$q_i(r, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d^3 r' f_{ij}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \frac{\partial c(r', t')}{\partial r'_j} \quad (5.2)$$

представляет собой поток частиц, связанный с переносом по bb . По сравнению с обычным уравнением переноса, выражающим закон сохранения полного числа частиц $N(t) \equiv \int d^3 r c(\vec{r}, t)$, в уравнении (5.1) содержится дополнительное слагаемое, описывающее уход частиц в de , а также локализацию их в кластерах меньших размеров:

$$Q = \int_{-\infty}^t dt' \varphi(t - t') c(\vec{r}, t'). \quad (5.3)$$

Ядро $f_{ij}(\vec{r}, t)$ в соотношении (5.2) определяет физический механизм переноса частиц. В этой работе мы будем считать ядро короткодействующим, имея в виду перенос за счет блуждания с ограниченным размером одного шага. Соответственно для описания процессов переноса на масштабах больше указанного шага уравнение (5.1) с учетом выражения (5.2) приобретает вид

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} + \int_{-\infty}^t dt' \varphi(t - t') c(\vec{r}, t') = D \Delta c. \quad (5.4)$$

Проанализируем структуру интегрального ядра $\varphi(t)$. Перколяционная система, обладая фрактальными свойствами, является самоподобной в пространственном интервале масштабов $\xi_0 \ll l \ll \xi$, где ξ_0 определяет ближний радиус корреляции. Отсюда следует существование временного интервала $\tau_0 \ll t \ll \tau$, в котором функция ядра $\varphi(t)$ также является самоподобной и может быть записана в виде

$$\varphi(t) \sim -\frac{1}{\tau_0^2} \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{1+\alpha}. \quad (5.5)$$

Знак «-» будет обоснован ниже. Показатель степени α заключен в интервале $0 < \alpha < 1$. Левая граница интервала вытекает из требования сходимости интеграла от функции $\varphi(t)$ на больших временах, а правая — из условия, чтобы вклад стока в (5.4) при $\tau_0 \ll t \ll \tau$ был определяющим по сравнению с производной по времени. Из сравнения различных членов (5.4) следует $\varphi(\tau_0)\tau_0 \sim D/\xi_0^2$ и $\varphi(\tau)\tau \sim D/\xi^2$, откуда для τ_0 и τ имеем

$$\tau_0 \sim \xi_0^2/D, \quad \tau \sim \tau_0 \left(\frac{\xi}{\xi_0} \right)^\alpha.$$

За пределами интервала фрактальности на больших временах ($t \gg \tau$) функция $\varphi(t)$ (аналогично пространственным корреляциям при $r \gg \xi_0$) убывает достаточно быстро, так что существуют все ее степенные моменты по времени. Мы также считаем, что на малых временах ($t < \tau_0$) вклад второго члена в (5.4) не превосходит вклада первого:

$$\varphi(t) \sim 1/\tau_0^2 \text{ при } t \lesssim \tau_0.$$

Следует подчеркнуть, что поскольку уравнение (5.4) получено путем усреднения по ансамблю реализаций среды, оно справедливо на пространственных масштабах больше ξ_0 .

Исходя из установленных свойств функции $\varphi(t)$, находим ее образ Лапласа φ_p . В диапазоне лапласовской переменной $\tau^{-1} \ll p \ll \tau_0^{-1}$:

$$\varphi_p \cong \frac{1}{\tau_0} (p\tau_0)^\alpha. \quad (5.6)$$

При малых $p < \tau^{-1}$ функция φ_p разлагается в ряд по целым степеням величины $p\tau$. Это свойство φ_p совместно с соотношением (5.6) позволяет сделать вывод, что φ_s имеет точку ветвления в комплексной плоскости $p_1 = -\tau^{-1}$ (что можно рассматривать как определение τ), значения φ_p при $p=0$ и $p=p_1$ одного порядка (если нет специальных условий), и для них справедлива оценка

$$\varphi_0 \lesssim \varphi_{p_1} \sim \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^\alpha. \quad (5.7)$$

5.3. Режимы переноса и профили концентрации ⁵

Исследуем на основе сформулированной модели поведение концентрации активных частиц примеси в зависимости от координат и времени. Для определенности будем иметь в виду задачу с начальным условием, считая, что при $t = 0$ все частицы сосредоточены в начале координат, выбор которого произволен ввиду трансляционной инвариантности постановки задачи о концентрации, усредненной по ансамблю реализаций; $c(\vec{r}, 0) = N_0 \delta(\vec{r})$. Решение уравнения (5.4) имеет вид

$$c(\vec{r}, t) = \frac{N_0}{4\pi D r} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp \left(- \left(\frac{\varphi_s + p}{D} \right)^{1/2} r + pt \right). \quad (5.8)$$

Рассмотрим следствия, вытекающие из этого выражения. На временах $t \ll \tau_0$ оно сводится к решению классического уравнения диффузии, в котором $Q = 0$ и соответственно $\varphi = 0$.

Перейдем к интервалу времени $\tau_0 \ll t \ll \tau$. Интегрированием выражения (5.8) по всему пространству получаем полное число активных частиц в зависимости от времени

$$\frac{N(t)}{N(0)} = \Gamma(\alpha) \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{1-\alpha}. \quad (5.9)$$

Отметим, что положительный знак справа здесь обусловлен знаком « \rightarrow » в формуле (5.5), что и является доказательством правильности выбора этого знака. Концентрация активных частиц при $\tau_0 \ll t \ll \tau$ и дополнительном условии $1 \ll r/\xi_0 \ll t/\tau_0$ согласно (5.8) имеет общую структуру:

$$c(\vec{r}, t) = \frac{1}{\xi_0^3} \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{\frac{2+\alpha}{2}} F(\eta), \quad \eta \equiv \frac{r^2}{4Dt} \left(\frac{t}{\tau_0} \right)^{1-\alpha}. \quad (5.10)$$

Функция $F(\eta)$ быстро убывает при $\eta > 1$. Отсюда следует, что среднее смещение частиц примеси за время t имеет оценку

⁵ По материалам [47; 50].

$$R(t) \sim \xi_0 (t/\tau_0)^{\frac{\alpha}{2}}, \quad (5.11)$$

свидетельствующую о том, что ввиду неравенства $0 < \alpha < 1$ перенос примеси в рассматриваемой модели отвечает режиму субдиффузии.

Концентрация активных частиц на малых расстояниях

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{\Gamma\left(\frac{2+\alpha}{2}\right) \sin \frac{\pi\alpha}{2}}{4\pi^2} \frac{1}{\xi_0^3} \left(\frac{\tau_0}{t}\right)^{\frac{2+\alpha}{2}} \quad \text{при } \eta \ll 1. \quad (5.12)$$

Отметим, что это выражение, как следует из (5.9) и (5.11), удовлетворяет очевидному соотношению $c(0, t) \sim N(t)/R^3(t)$.

Концентрация на далеких расстояниях (в хвосте) дается формулой

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_0}{(4\pi Dt)^{3/2}} \left(\frac{\tau_0}{t}\right)^{-\frac{1-\alpha}{2}} \frac{\alpha^{\frac{1}{2-\alpha}}}{\sqrt{2-\alpha}} \eta^{-\frac{1-\alpha}{2(2-\alpha)}} \exp\left\{-\frac{2-\alpha}{\alpha} (\alpha^2 \eta)^{\frac{1}{2-\alpha}}\right\}, \quad (5.13)$$

$$\eta \gg 1.$$

Данное выражение описывает поведение концентрации вплоть до расстояний $r \sim \xi_0 t/\tau_0$. На еще больших расстояниях, таких что $r/\xi_0 \gg t/\tau_0$, выражение (5.13) перестает быть справедливым, поскольку динамика системы описывается гармониками с волновыми векторами $k > \xi_0^{-1}$, для которых модель (5.1)—(5.7) неприменима. На этих расстояниях для концентрации можно указать только мажорирующее выражение:

$$c(\vec{r}, t) < \frac{N_0}{(4\pi Dt)^{3/2}} \frac{\alpha}{\sqrt{2-\alpha}} \exp\left\{-\frac{2-\alpha}{\alpha} \frac{t}{\tau_0}\right\}. \quad (5.14)$$

Поведение концентрации на временах $t \gg \tau$ зависит от того, является ли перколяционная система до- или запороговой. В допороговом состоянии имеет место асимптотика

$$c(\vec{r}, t) \sim \frac{N_0}{\xi_0^3} \left(\frac{\xi_0}{\xi}\right)^{\frac{2+\alpha}{\alpha}} \left(\frac{\tau}{t}\right)^{1+\alpha} \exp\left(-\frac{r}{\xi} - \frac{t}{\tau}\right).$$

При ее получении было учтено, что согласно (5.7) функция φ_p имеет точку ветвления при $p \sim -\tau^{-1}$ и оценку $\varphi_0 \sim \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{\tau_0}{\tau}\right)^\alpha$.

Для переноса примеси в системах, находящихся выше порога перколяции, активная концентрация разбивается на две части:

$$c(\vec{r}, t) = c_f(\vec{r}, t) + c_\infty(\vec{r}, t).$$

Первая из них, начальные условия для которой определяются соотношением

$$c_f(\vec{r}, 0) = c(\vec{r}, 0)(1 - P_\infty),$$

отвечает примесям, принадлежащим конечным кластерам, а вторая, для которой

$$c_\infty(r, 0) = c(r, 0)P_\infty,$$

отвечает бесконечному кластеру. Поведение концентрации $c_f(\vec{r}, t)$ совпадает с уже рассмотренным поведением для допороговых состояний. К этим же закономерностям сводится и поведение концентрации $c_\infty(\vec{r}, t)$ при $t < \tau$ с той лишь разницей, что индекс α в (5.6), хотя и удовлетворяет неравенству $0 < \alpha < 1$, отличается теперь от прежнего значения.

Кардинальное отличие поведения концентрации $c_\infty(\vec{r}, t)$ на временах $t > \tau$ связано с тем, что для бесконечного кластера имеет место равенство $\varphi_0 = 0$. Оно вытекает из того факта, что при $t \rightarrow \infty$ количество активных частиц на бесконечном кластере стремится к конечному пределу. В самом деле, из уравнения

$$\frac{\partial N_\infty}{\partial t} + \int_0^t dt \varphi(t-t') N_\infty(t') = 0,$$

получающегося из (5.4) интегрированием по всему пространству, в силу того что

$$N_\infty(\infty) \neq 0 \text{ и } \frac{\partial N_\infty(\infty)}{\partial t} = 0,$$

получаем

$$\int_0^\infty dt \varphi(t) \equiv \varphi_0 = 0.$$

По этой причине в области $s \ll \tau^{-1}$ главным членом разложения функции φ_s является $\varphi_s \cong As$, где $A \sim (\tau/\tau_0)^{1-\alpha} \gg 1$.

Из этого обстоятельства вытекают два важных следствия. Первое: при $t \gg \tau$ концентрация $c_\infty(\vec{r}, t)$ удовлетворяет классическому уравнению диффузии с перенормированным коэффициентом диффузии

$$\tilde{D} = \frac{D}{A}. \quad (5.15)$$

Второе следствие дает отношение величин концентрации при $t \rightarrow \infty$ и $t = 0$:

$$N_\infty(\infty) = \frac{N_\infty(0)}{A}. \quad (5.16)$$

Поведение концентрации на бесконечном кластере при $t \gg \tau$ в хвосте имеет следующий вид. Сначала при $\sqrt{\tilde{D}t} \ll r \ll \xi(t/\tau)$ идет гауссова асимптотика с перенормированным коэффициентом диффузии \tilde{D} и числом частиц, уменьшенным в A раз, а за ней следует субдиффузионная асимптотика типа (5.13) с указанными ограничениями (5.14).

6. Заключение

Цель настоящей статьи состояла в том, чтобы выявить основные структурные особенности геологических сред, способных привести к возникновению неклассических процессов переноса примеси, и представить ряд физических моделей, отражающих указанные особенности и демонстрирующие аномальные режимы переноса.

Отмечены два фактора, влияние которых наиболее существенно для формирования механизмов переноса. Первый состоит в том, что неоднородные структуры натуральных сетей трещин в скалистых породах обладают, как правило, фрактальной геометрией и образуют перколяционные среды. Это служит основанием для установления в среде медленно (по степенному закону) убывающих корреляций характеристик среды, что, в частности, относится к корреляциям скорости инфильтрации влаги по трещинам. Такое положение создает предпосылки для реализации быстрых (субдиффузионных) режимов переноса примеси. Второй фактор заключается в наличии резкого контраста в распределении характеристик геологических сред. Слабопроницаемая подсистема, роль которой играют матрица трещиноватой геологической среды и мертвые концы перколяционных кластеров, отвечающих сети трещин, действуют как ловушки для частиц при-

меси. В итоге возникает тенденция к медленным (субдиффузионным) режимам переноса.

Основные результаты работы состоят в следующем.

1. В модели случайной адвекции при достаточно медленном убывании корреляций скорости реализуется супердиффузионный режим переноса примеси. При этом хвосты концентрации не являются степенными. Более того, они оказываются еще «короче», чем классические гауссовы хвосты при классической диффузии.

2. В модели случайной адвекции с конечным радиусом корреляции на ранних временах перенос идет в режиме супердиффузии, а на поздних переходит в режим классической диффузии. Пространственная зависимость хвоста концентрации на поздних временах имеет двухступенчатую структуру, так что ближний участок хвоста является гауссовым, а дальний соответствует супердиффузионному режиму.

3. При диффузии в регулярно неоднородных резко контрастных средах в зависимости от интервала времени реализуется несколько режимов переноса, один из которых соответствует субдиффузии. При достаточно резком контрасте среды промежуточный субдиффузионный режим концентрации может на практике играть роль асимптотического во времени режима. Смена режимов переноса во времени приводит к сложной (многоступенчатой) структуре хвостов концентрации: на промежуточных временах она является двухступенчатой, а на самых поздних — трехступенчатой.

4. При диффузии по перколяционной среде, находящейся в состоянии выше порога перколяции, на относительно ранних временах перенос идет в режиме субдиффузии, а на поздних — по классической диффузии.

5. Во всех исследованных случаях ближняя ступень асимптотики концентрации определяется тем режимом переноса, который свойствен данному интервалу времени, следующая ступень задается режимом предыдущего интервала времени. Чем более удаленной является ступень концентрационного хвоста, тем более ранний режим переноса ее определяет.

6. Закон асимптотического убывания концентрации с расстоянием находится в прямой зависимости от степени роста со временем размера основной области локализации примеси в том режиме переноса, который отвечает данному участку асимптотики. Чем быстрее рост размера основной области локализации со временем, тем быстрее убывание соответствующей асимптотики с расстоянием.

В дальнейших исследованиях предполагается расширить класс физических факторов, приводящих к неклассическим режимам переноса, проана-

лизировать конкуренцию между различными механизмами и выявить особенности процессов переноса, возникающие за счет сильных пространственных флуктуаций структурных характеристик неоднородной среды.

Литература

1. *Isichenko M. B.* Percolation, statistical topography, and transport in random media // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — Vol. 64. — P. 961.
2. *Bouchaud J.-P., Georges A.* Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models, and physical applications // *Phys. Rep.* — 1990. — Vol. 195. — P. 127.
3. *Havlin S., ben-Avraham D.* Diffusion in disordered media // *Adv. Phys.* — 1987. — Vol. 36. — P. 695.
4. *Зеленый Л. М., Милованов А. В.* Фрактальная топология и странная кинетика: от теории перколяции к проблемам космической электродинамики // *УФН.* — 2004. — Т. 174. — С. 809.
5. *The Disposal of Radioactive Waste on Land / National Research Council (NRC).* — Washington, DC: National Academy Press, 1957.
6. *Montroll E. W., Weiss G.* Random walks on lattices. II // *J. Math. Phys.* — 1965. — Vol. 6. — P. 167.
7. *Montroll E. W., Scher H.* Random walks on lattices. IV: Continuous-time random walks and influence of absorbing boundary conditions // *J. Stat. Phys.* — 1973. — Vol. 9. — P. 101.
8. *Khintchine A., Levy P.* Sur les lois stables // *C. R. Acad. Sci. Paris.* — 1936. — Vol. 202. — P. 374.
9. *Wyss W.* The fractional diffusion equation // *J. Math. Phys.* — 1986. — Vol. 27. — P. 2782.
10. *Schneider W. R., Wyss W.* Fractional diffusion and wave equations // *J. Math. Phys.* — 1989. — Vol. 30. — P. 134.
11. *Compte A.* Stochastic foundations of fractional dynamics // *Phys. Rev. E.* — 1996. — Vol. 53. — P. 4191.
12. *Дрейзин Ю. А., Дыхне А. М.* Аномальная проводимость неоднородных сред в сильном магнитном поле // *ЖЭТФ.* — 1972. — Т. 63. — С. 242.
13. *Дыхне А. М., Напартович А. П.* Перенос резонансного излучения в неоднородной плазме. — М.: Ин-т. атом. энергии, 1970.
14. *Зельдович Я. Б.* Точное решение задачи о диффузии в периодическом поле скоростей и турбулентная диффузия // *Докл. Акад. наук.* — 1982. — Т. 266. — С. 821.
15. *Koch D. L., Brady J. F.* Anomalous diffusion in heterogeneous porous media // *Phys. Fluids.* — 1988. — Vol. 31. — P. 965.

16. Koch D. L., Brady J. F. Anomalous diffusion due to long-range velocity fluctuations in the absence of a mean flow // *Phys. Fluids A*. — 1989. — Vol. 1. — P. 47.
17. Bolshov L., Kondratenko P., Pruess K., Semenov V. Nonclassical Transport Processes in Geologic Media: Review of Field and Laboratory Observations and Basic Physical Concepts // *Vadose Zone J.* — 2008. — Vol. 7, № 4. — P. 1135—1144.
18. Schmittbuhl J., Schmitt F., Sholz C. H. Scaling invariance of crack surfaces // *J. Geophys. Res.* — 1995. — Vol. 100 (B4). — P. 5953—5973.
19. Novakowski K. S., Bikerton G. S. Borehole measurement of the hydraulic properties of low-permeability rock // *Water Resour. Res.* — 1997. — Vol. 33, № 11. — P. 2509—2517.
20. Chang J., Yortsos Y. S. Pressure Transient Analyses of Fractal Reservoirs: Paper SPE 18170. Presented on 63rd Annual SPE Technical Conference and Exhibition, Soc. of Pet. Eng., Houston, Tex., October 2—5, 1988. — [S. 1.], 1988.
21. Riemann K., Van Tonder G. Interpretation of single-well tracer tests using fractional-flow dimensions. Pt. 1: Theory and mathematical models // *Hydrogeology J.* — 2002. — Vol. 10. — P. 351—356.
22. Acuna J. A., Yortsos Y. S. Applications of Fractal Geometry to the Study of Network of Fractures and their Pressure Transient // *Water Resour. Res.* — 1995. — Vol. 31, № 3. — P. 527—540.
23. Barker J. A. A generalized radial flow model for hydraulic tests in fractured rock // *Water Resour. Res.* — 1988. — Vol. 24, № 10. — P. 1796—1804.
24. Filho J. M. A fractal dimension model for hydraulic parameter evaluation from single well tests in fractured media // *Proceedings of Int. Conf. on Groundwater in Fractured Rocks*. 2003, Prague. — [S. 1.], 2003. — P. 251—252.
25. Jourde H., Piste S., Perrochet P., Drogue C. Origin of Fractional Flow Dimension to a Partially Penetrating Well in Stratified Fractured Reservoir New results Based on Synthetic Fracture Network // *Advances in Water Resources*. — 2002. — Vol. 25. — P. 371—387.
26. Doe T. W. Fractional dimension analyses of constant pressure well tests // *Proceedings, Annual SPE Technical Conference and Exhibition, Formation Evaluation and Reservoir Geology*, Soc. of Pet. Eng, Dallas, Tex, October 6—9. 1991. — [S. 1.], 1991. — P. 461—467.
27. Widestrand H., Anderson P., Byegard J. et al. In-situ Migration Experiments at Aspö Hard Rock Laboratory, Sweden: Results of Radioactive Tracer Migration Studies in a Single Fracture // *J. of*

- Radioanalytical and Nuclear Chemistry. — 2001. — Vol. 250, № 3. — P. 501—517.
28. *Becker M. W., Shapiro A. M.* Tracer transport in fractured crystalline rock: Evidence of nondiffusion breakthrough tailing // *Water Resour. Res.* — 2000. — Vol. 36, № 7. — P. 1677—1686.
29. *Meerschaert M., Benson D. A., Baumer B.* Operator Levy motion and multiscaling anomalous diffusion // *Phys. Review E.* — 2001. — Vol. 63, № 2. — P. 1112—1117.
30. *Benson D. A., Shumer R., Meerschaert M., Wheatcraft S. V.* Fractional dispersion, Levy motion, and the MADE tracer tests // *Transport in porous media.* — 2001. — Vol. 42. — P. 211—240.
31. *Mandelbrot B. B.* *The Fractal Geometry of Nature.* — San Francisco: Freeman, 1982.
32. *Шкловский Б. И., Эфрос А. Л.* Теория протекания и проводимость сильно неоднородных сред // *УФН.* — 1975. — Т. 117. — В. 3. — С. 401—435.
33. *Sahimi M.* Flow phenomena in rocks: From continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing // *Rev. Mod. Phys.* — 1993. — Vol. 65. — P. 1393—1534.
34. *Паташинский А. З., Покровский В. Л.* Флуктуационная теория фазовых переходов. — М.: Наука, 1975.
35. *Ma S.-K.* *Modern Theory of Critical Phenomena.* — London: Benjamin, 1976.
36. *Dykhne A. M., Dranikov I. L., Kondratenko P. S., Matveev L. V.* Anomalous diffusion in a self-similar random advection field // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 72, № 6.
37. *Bolshov L., Kondratenko P., Matveev L., Pruess K.* Elements of Fractal Generalization of Dual-Porosity Model for Solute Transport in Unsaturated Fractured Rocks // *Vadose Zone J.* — 2008. — Vol. 7, № 4. — P. 1152—1160.
38. *Федорюк М. В.* *Метод перевала.* — М.: Наука, 1977.
39. *Зинн-Жюстен Ж.* *Континуальный интеграл в квантовой механике.* — М.: Физматлит, 2006.
40. *Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е.* *Методы квантовой теории поля в статистической физике.* — М.: ИФМЛ, 1962.
41. *Финкельберг В. М.* Распространение волн в случайной среде: Метод корреляционных групп // *ЖЭТФ.* — 1967. — Т. 53. — С. 40.
42. *Kondratenko P. C., Matveev L. V.* Random advection in fractal medium with finite correlation length // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Vol. 75, № 5.
43. *Guyer R. A.* Conductivity fluctuations and the amplitude of the long-time tail // *Phys. Rev. B.* — 1986. — Vol. 34. — P. 7816.

44. Dykhne A. M., Dranikov I. L., Kondratenko P. S. Anomalous diffusion in regular heterogeneous media // J. of Hydraulic Research. — 2005. — Vol. 43, № 2. — P. 213—216.
45. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.). — М.: Наука, 1979.
46. Кондратенко П. С., Матвеев Л. В. Асимптотические режимы и структура «хвостов» концентрации в модели Дыхне // ЖЭТФ. — 2007. — Т. 131. — В. 3. — С. 494—499.
47. Dykhne A., Dranikov I., Kondratenko P., Matveev L. Transport Regimes and Concentration Tails for Classical Diffusion in Heterogeneous Media with Sharply Contrasting Properties // Vadose Zone J. — 2008. — Vol. 7, № 4. — P. 1145—1151.
48. Bonnet E., Bour O., Odling N. E. et al. Scaling of fracture systems in geological media // Rev. of Geophysics. — 2001. — Vol. 39. — P. 347.
49. O'Shaughnessy B., Procaccia I. Analytical solutions for diffusion on fractal objects // Phys. Rev. Lett. — 1985. — Vol. 54. — P. 455—458.
50. Дыхне А. М., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В. Перенос примеси в перколяционных средах // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80, № 6. — С. 464—467.

Статистическая теория кластеризации частиц в однородной турбулентности и ее приложения

Л. И. Зайчик, В. М. Алипченков

1. Введение

Движение небольших тяжелых частиц в турбулентной среде (жидкости) встречается во многих природных явлениях и технологических процессах. Распространение атмосферных аэрозолей, формирование дождевых капель, эволюция кучевых облаков, динамика песчаных бурь представляют собой примеры природных явлений. Примеры технологических процессов: распространение радиоактивных аэрозолей в атомном реакторе, горение распыленного твердого и жидкого топлива, сепарация капель и аэрозолей в циклонах, пневмотранспорт угольной пыли и т. д.

Благодаря инерции поле скорости частиц будет сжимаемым даже при их движении в несжимаемой жидкости, и, следовательно, может иметь место сильная корреляция между полем дивергенции скорости и концентрацией частиц [1; 2]. Сжимаемость поля скорости частиц имеет фундаментальное значение, так как приводит к флуктуациям концентрации, сегрегации и кластеризации инерционных частиц. Образование *кластеров* — компактных областей со значительно повышенной концентрацией дисперсной фазы, окруженных зонами с низкой концентрацией, — одно из наиболее интересных и сложных явлений, обусловленных взаимодействием частиц с турбулентными вихрями [3—33].

К настоящему времени достигнут значительный прогресс в численном моделировании явлений аккумуляирования и кластеризации частиц в однородной изотропной турбулентности, однако число экспериментальных исследований пока невелико [13; 25; 32; 33]. Следует различать два класса течений, в которых могут образовываться кластеры: неоднородные и однородные турбулентные потоки. Явление кластеризации (аккумуляирования) тяжелых частиц в неоднородных турбулентных потоках объясняется их турбулентной миграцией (*турбофорезом*) из области с высокой интенсивностью турбулентных пульсаций скорости в зону с низкой степенью турбулентности (например, в область вязкого подслоя пристеночного течения в канале) [34; 35]. Однако эффект кластеризации инерционных частиц имеет место и в однородной турбулентности, где отсутствуют градиен-

ты пульсаций скорости несущего потока и, следовательно, механизм транспорта частиц под действием турбофореза в его традиционном понимании не имеет места. Локальное повышение концентрации тяжелых частиц наблюдается в областях с малой завихренностью вследствие действия центробежной силы и обусловлено главным образом взаимодействием частиц с мелкомасштабными вихревыми структурами. Поэтому наиболее явно эффектом кластеризации проявляется при совпадении времени динамической релаксации частиц и временного колмогоровского масштаба турбулентности. Безынерционные частицы полностью вовлекаются в пульсационное движение несущей жидкости и, следовательно, однородно распределены в пространстве. Высокоинерционные частицы слабо взаимодействуют с пульсациями турбулентной жидкости и также однородно распределены в пространстве. Явление кластеризации частиц в однородной турбулентности обусловлено относительным движением двух частиц (в разреженных дисперсных системах), поэтому его моделирование требует привлечения двухточечных подходов. В [36; 37] явление аккумуляции интерпретируется как результат миграции частиц под действием силы турбофореза в пространстве относительного движения пары частиц. Эта сила стремится уменьшить расстояние между двумя частицами, т. е. вызывает «притяжение» частиц друг к другу вследствие их взаимодействия с турбулентными вихрями. Таким образом, несмотря на стохастическую природу турбулентности, статистические характеристики распределения инерционных частиц в турбулентных потоках не являются случайными.

Явления аккумуляции и образования кластеров инерционных частиц в однородной турбулентности играют важную роль в самых различных физических процессах. Так, этот эффект приводит к существенному повышению скоростей седиментации [4; 13; 38; 39] и столкновений/коагуляции [7; 8; 40—48] частиц. Особенно существенную роль эффект аккумуляции частиц играет в атмосферных процессах при больших числах Рейнольдса. По-видимому, только учет этого эффекта при расчете скорости коагуляции позволяет объяснить феномен быстрого роста капель в дождевых облаках [49; 50], а также отклонение от экспоненциального закона Бера—Ламберта для затухания излучения в запыленной среде [51]. Вследствие этого явлению аккумуляции частиц в однородной турбулентности посвящено большое количество исследований. Отметим, что существенную роль в увеличении скорости столкновений/коагуляции может играть механизм, отличный от пространственной кластеризации. Этот механизм обусловлен формированием каустик с многозначным полем скорости частиц [50; 52—54] и предсказывает дополнительный вклад в скорость столкновений благодаря так называемому эффекту петли [55].

Для количественной характеристики аккумуляции частиц могут быть использованы различные критерии. Так, поскольку тяжелые частицы концентрируются в областях с малой завихренностью (с бóльшим растяжением), для этой цели подходит второй инвариант тензора градиента скорости сплошной среды [3]. Широкое распространение (см., например, [3; 5; 10; 11; 16]) получил способ описания аккумуляции на основе отклонения плотности вероятности числа частиц, находящихся в фиксированных пространственных ячейках, от пуассоновского распределения, соответствующего статистически независимому случайному распределению частиц. Однако наиболее удобной характеристикой эффекта аккумуляции частиц с точки зрения его включения в расчетные модели различных процессов (столкновений и коагуляции частиц, седиментации под действием силы тяжести, рассеяния излучения на аэрозолях и т. д.) является радиальная функция распределения (РФР), равная отношению плотности вероятности обнаружения пары частиц к соответствующей величине в однородной суспензии.

В данной работе развивается двухточечная статистическая теория дисперсии и кластеризации частиц, предложенная в [36; 56]. Сделанные улучшения теоретических моделей, представленных в [36; 52], касаются уточнения аппроксимации лагранжевой двухточечной структурной функции жидкости, определяемой вдоль траекторий частиц (видимой частицами). Кроме того, теория, предложенная для точечных частиц (частиц нулевого размера), расширена на частицы конечного размера. Она основана на кинетическом уравнении для двухточечной функции плотности вероятности (ФПВ) относительной скорости пары частиц. Поле скорости турбулентной жидкости предполагается однородным, изотропным и несжимаемым. Концентрация частиц считается достаточно малой, чтобы можно было пренебречь обратным влиянием частиц на турбулентность. Развиваемые теоретические модели в существенной степени опираются на гипотезу локального подобия, игнорирующую явление перемежаемости. Известно, что возможность построения универсальных решений для задач, связанных с относительной дисперсией пары частиц в турбулентной среде при больших числах Рейнольдса, не согласуется с явлением перемежаемости, обусловленным флуктуациями скорости диссипации турбулентной энергии [57—59]. Без учета перемежаемости справедлива классическая гипотеза подобия Колмогорова для мелкомасштабной турбулентности [60]. Эта гипотеза устанавливает универсальность мелкомасштабной турбулентности, т. е. подразумевает независимость характеристик турбулентности в вязком и инерционном интервалах при больших числах Рейнольдса от крупномасштабных вихревых структур. Влияние перемежаемости приводит к зависимости характеристик мелкомасштабной турбулентности от числа Рейнольдса. Поэтому получение универсальных (автомодельных по числу Рейнольдса) решений возможно только для относительно малоинерционных частиц, время релаксации которых

принадлежит к вязкому или инерционному интервалу, при незначительной роли явления перемежаемости. Наличие такой универсальной зависимости для радиальной функции распределения подтверждается по крайней мере для частиц со временем релаксации в вязком интервале результатами прямого численного моделирования (Direct Numerical Simulation — DNS) [20]. Представленные в данной главе решения при больших числах Рейнольдса получены в рамках классической гипотезы локального подобия при пренебрежении эффектами перемежаемости. В [60] показана справедливость классической теории локального подобия Колмогорова в инерционном интервале при $Re_\lambda \rightarrow \infty$, однако установлено, что показатель перемежаемости, характеризующий аномальный скейлинг, стремится к нулю очень медленно (по логарифмическому закону). Поскольку чувствительность к перемежаемости усиливается с ростом порядка статистического момента флуктуаций характеристик турбулентного поля, результаты анализа без учета явления перемежаемости могут быть справедливы только для моментов ФПВ невысокого порядка.

В статье представлены результаты применения двухточечной статистической теории для учета эффекта кластеризации частиц на скорости столкновений и седиментации, а также интенсивности рассеяния микроволнового излучения. Кроме того, как показано в [61], в стационарной изотропной турбулентности развиваемый нами статистический подход, основанный на кинетическом уравнении для двухточечной ФПВ, тесно связан с оригинальным теоретическим формализмом, предложенным для моделирования дисперсной фазы в [17; 24]. Этот формализм предполагает разложение турбулентного поля скорости частиц на две составляющие («коррелированную» и «некоррелированную»), интерпретируемые в рамках эйлера и лагранжева методов моделирования. В данной работе показана связь между двумя теоретическими подходами на примере нестационарной затухающей изотропной турбулентности. Наконец, мы используем двухточечную статистическую теорию для вычисления подсеточных напряжений частиц, необходимых для развития эйлера двухжидкостного моделирования двухфазных дисперсных турбулентных течений в рамках метода крупных вихрей.

В работе рассматриваются однородные изотропные турбулентные дисперсные течения с небольшими тяжелыми частицами. Концентрация частиц предполагается относительно небольшой, чтобы можно было пренебречь их обратным влиянием на характеристики турбулентной жидкости. Кроме того, рассматриваются одинаковые монодисперсные частицы, и хотя возможно обобщение представленных теоретических моделей на случай бидисперсных частиц (как это сделано в [45]), такое обобщение выходит за рамки данной работы.

В разделе 2 вводятся кинетическое уравнение для ФПВ распределения относительной скорости двух частиц и уравнения для двухточечных статистических моментов ФПВ. В разделах 3 и 4 рассматриваются статистика поля скорости и аккумулярование частиц в стационарном и затухающем изотропных турбулентных полях. Остальная часть статьи посвящена приложениям двухточечной статистической теории дисперсии и аккумулярования частиц. В разделе 5 анализируется влияние инерционности частиц на скорость турбулентных столкновений. Разделы 6 и 7 демонстрируют эффект кластеризации соответственно на скорость гравитационной седиментации частиц и интенсивность рассеяния излучения на частицах. В разделе 8 анализируется влияние размера фильтра и инерционности частиц на подсчетные напряжения. Заключение и выводы помещены в разделе 9.

2. Теоретическая формулировка

Относительное движение двух тяжелых одинаковых частиц в турбулентной жидкости описывается уравнениями

$$\frac{d\mathbf{r}_p}{dt} = \mathbf{w}_p, \quad \frac{d\mathbf{w}_p}{dt} = \frac{\Delta\mathbf{u}(\mathbf{r}_p, t) - \mathbf{w}_p}{\tau_p}, \quad (1)$$

$$\mathbf{r}_p = \mathbf{R}_{p2} - \mathbf{R}_{p1}, \quad \mathbf{w}_p = \mathbf{v}_{p2} - \mathbf{v}_{p1}, \quad \Delta\mathbf{u}(\mathbf{r}_p, t) = \mathbf{u}(\mathbf{R}_{p2}, t) - \mathbf{u}(\mathbf{R}_{p1}, t),$$

где \mathbf{r}_p и \mathbf{w}_p — векторы расстояния между частицами и их относительной скорости; $\Delta\mathbf{u}(\mathbf{r}_p, t)$ — вектор инкремента скоростей жидкости в точках расположения частиц; $\mathbf{R}_{p\alpha}$ и $\mathbf{v}_{p\alpha}$ — вектор траектории и скорости частиц ($\alpha = 1, 2$); $\mathbf{u}(\mathbf{R}_{p\alpha}, t)$ — скорость жидкости в точке расположения частицы; τ_p — время динамической релаксации частицы. Отметим, что уравнения (1) справедливы для частиц, плотность которых много больше плотности несущей среды (жидкости) и радиус которых не превышает колмогоровского пространственного масштаба турбулентности.

2.1. Кинетическое уравнение для ФПВ

Чтобы перейти от стохастических уравнений (1) к статистическому описанию относительного движения двух частиц, вводится ФПВ распределения относительной скорости

$$P = \langle p \rangle = \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_p(t)) \delta(\mathbf{w} - \mathbf{w}_p(t)) \rangle, \quad (2)$$

где $\delta(\mathbf{x})$ — дельта-функция Дирака. Функция $P(\mathbf{r}, \mathbf{w}, t)$ определяется как вероятность реализации относительной скорости \mathbf{w} в момент времени t для частиц, находящихся на расстоянии \mathbf{r} . Угловые скобки в (2) обозначают осреднение по ансамблю случайных реализаций турбулентного поля скорости жидкости. Дифференцируя (2) по времени, учитывая (1) и разлагая инкремент скоростей жидкости на осредненную и пульсационную составляющие ($\Delta \mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \Delta U(\mathbf{r}, t) + \Delta \mathbf{u}'(\mathbf{r}, t)$), получаем транспортное уравнение для ФПВ относительной скорости пары частиц

$$\frac{\partial P}{\partial t} + w_i \frac{\partial P}{\partial r_i} + \frac{1}{\tau_p} \frac{\partial (\Delta U_i - w_i) P}{\partial w_i} = - \frac{1}{\tau_p} \frac{\partial \langle \Delta u'_i p \rangle}{\partial w_i}. \quad (3)$$

Уравнение (3) не замкнуто, поскольку содержит неизвестную корреляцию $\langle \Delta u'_i p \rangle$, характеризующую взаимодействие частиц с турбулентными вихрями. Для определения $\langle \Delta u'_i p \rangle$ поле скорости жидкости моделируется гауссовым случайным процессом с известными корреляционными моментами. Моделирование турбулентных пульсаций скорости жидкости гауссовым случайным процессом является ключевым допущением, которое позволяет выразить корреляцию между пульсациями инкремента скоростей жидкости в двух точках и плотностью вероятности относительной скорости пары частиц в этих точках $\langle \Delta u'_i p \rangle$ в замкнутой форме. Отметим, что в действительности ФПВ относительной скорости жидкости не является гауссовым распределением [57—59]. Отклонение ФПВ двухточечной разности скоростей от гауссова распределения, как известно, является следствием явления перемежаемости. Однако заметное отличие от нормального распределения проявляется главным образом при больших абсолютных значениях относительных скоростей, т. е. играет роль только для хвостов ФПВ, а при малых относительных скоростях нормальное распределение является хорошим приближением для ФПВ (например, [62]). Поскольку вклад хвостов ФПВ в средние характеристики не очень существен, гауссов случайный процесс достаточно хорошо предсказывает двухточечные моменты относительных скоростей [63].

Применяя функциональный формализм, для гауссова поля скорости несущей жидкости можно представить корреляцию между пульсациями инкремента скоростей жидкости и плотностью вероятности относительной скорости пары частиц в виде [56]

$$\langle \Delta u'_i p \rangle = - \int_{-\infty}^t \langle \Delta u'_i(\mathbf{r}, t) \Delta u'_j(\mathbf{r}_p(t_1), t_1) \rangle \left\{ \frac{\delta_{jk}}{\tau_p} \exp\left(-\frac{t-t_1}{\tau_p}\right) + \right.$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{\partial \Delta U_j}{\partial r_k} \left[1 - \left(1 + \frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \exp \left(-\frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \right] \Bigg] dt_1 \frac{\partial P}{\partial w_k} - \\
 & - \int_{-\infty}^t \langle \Delta u'_i(\mathbf{r}, t) \Delta u'_k(\mathbf{r}_p(t_1), t_1) \rangle \left[1 - \exp \left(-\frac{t-t_1}{\tau_p} \right) \right] dt_1 \frac{\partial P}{\partial r_k}. \quad (4)
 \end{aligned}$$

Чтобы рассчитать интегралы в (4), необходимо определить лагранжеву двухточечную структурную функцию, видимую частицами:

$$\begin{aligned}
 S_{Lij}(\mathbf{r}, t, \tau) &= \langle \Delta u'_i(\mathbf{r}, t) \Delta u'_j(\mathbf{r}_p(t-\tau), t-\tau) \rangle = \\
 &= \langle (u'_i(\mathbf{R}_{p2}(t), t) - u'_i(\mathbf{R}_{p1}(t), t)) (u'_j(\mathbf{R}_{p2}(t-\tau), t-\tau) - u'_j(\mathbf{R}_{p1}(t-\tau), t-\tau))) \rangle, \\
 \mathbf{r} &= \mathbf{R}_{p2}(t) - \mathbf{R}_{p1}(t).
 \end{aligned}$$

В [56] лагранжева двухточечная структурная функция определялась следующим образом:

$$\begin{aligned}
 S_{Lij}(\mathbf{r}, t, \tau) &= \left(\Sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) - \frac{\tau}{2} \frac{D_p \Sigma_{ij}(\mathbf{r}, t)}{Dt} \right) \Psi_\sigma(\tau) + \\
 &+ \left(\Omega_{ij}(\mathbf{r}, t) - \frac{\tau}{2} \frac{D_p \Omega_{ij}(\mathbf{r}, t)}{Dt} \right) \Psi_\omega(\tau), \quad (5)
 \end{aligned}$$

$$\Sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) = \langle \sigma_{ik}(\mathbf{x}, t) r_k \sigma_{jn}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) r_n \rangle, \quad \Omega_{ij}(\mathbf{r}, t) = \langle \omega_{ik}(\mathbf{x}, t) r_k \omega_{jn}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) r_n \rangle,$$

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right), \quad \omega_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} - \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right).$$

Здесь $\Sigma_{ij}(\mathbf{r}, t)$ и $\Omega_{ij}(\mathbf{r}, t)$ обозначают эйлеровы двухточечные тензоры скоростей деформации и вращения жидкости, $\Psi_\sigma(\tau)$ и $\Psi_\omega(\tau)$ — автокорреляционные функции, характеризующие затухание во времени тензоров деформации и вращения в точках, находящихся на расстоянии $r \equiv |\mathbf{r}|$. Очевидно, что имеет место соотношение

$$\Sigma_{ij} + \Omega_{ij} = S_{ij}, \quad (6)$$

$$S_{ij}(\mathbf{r}, t) = \langle \Delta u'_i \Delta u'_j \rangle = \langle (u'_i(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) - u'_i(\mathbf{x}, t)) (u'_j(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) - u'_j(\mathbf{x}, t)) \rangle,$$

где $S_{ij}(\mathbf{r}, t)$ — эйлерова структурная функция второго порядка, определяющая инкремент скоростей жидкости в двух точках. В вязком пространственном интервале $r \leq \eta$, где $\eta \equiv (\nu^3 / \varepsilon)^{1/4}$ — колмогоровский пространственный микромасштаб; ν — коэффициент кинематической вязкости жидкости; ε — скорость диссипации турбулентной энергии, тензоры деформации и вращения определяются по формулам

$$\Sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{\varepsilon}{20\nu} \left(r^2 \delta_{ij} + \frac{r_i r_j}{3} \right), \quad \Omega_{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{\varepsilon}{12\nu} \left(r^2 \delta_{ij} - r_i r_j \right). \quad (7)$$

Единственное отличие от модели, представленной в [56], состоит в определении так называемых транспортных членов $D_p \Sigma_{ij}(\mathbf{r}, t) / Dt$ и $D_p \Omega_{ij}(\mathbf{r}, t) / Dt$, которые учитывают вклад нестационарности, конвекции и диффузии пульсаций скорости жидкости в лагранжеву двухточечную структурную функцию (5). В то время как в [56] было высказано предположение, что пульсации скорости жидкости переносятся со скоростью частиц, в данной работе транспортные члены определяются с использованием относительной скорости двух жидких элементов, движущихся вдоль траекторий инерционных частиц (так называемой видимой частицами скорости жидкости). В соответствии с этим определением транспортные члены задаются соотношениями

$$\begin{aligned} \frac{D_p \Sigma_{ij}}{Dt} &= \frac{\partial \Sigma_{ij}}{\partial t} + \Delta U_{pk} \frac{\partial \Sigma_{ij}}{\partial r_k} + \frac{\partial \Sigma_{ijk}}{\partial r_k}, \\ \frac{D_p \Omega_{ij}}{Dt} &= \frac{\partial \Omega_{ij}}{\partial t} + \Delta U_{pk} \frac{\partial \Omega_{ij}}{\partial r_k} + \frac{\partial \Omega_{ijk}}{\partial r_k}, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\Sigma_{ijk}(\mathbf{r}, t) = \langle \sigma_{il}(\mathbf{x}, t) r_l \sigma_{jm}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) r_m \Delta u'_k(\mathbf{r}, t) \rangle_p,$$

$$\Omega_{ijk}(\mathbf{r}, t) = \langle \omega_{il}(\mathbf{x}, t) r_l \omega_{jm}(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) r_m \Delta u'_k(\mathbf{r}, t) \rangle_p,$$

где ΔU_{pi} — средняя относительная скорость двух жидких элементов, движущихся вдоль траекторий инерционных частиц. Величины ΔU_{pi} , Σ_{ijk} и Ω_{ijk} будут определены ниже. Отметим, что изменение в определении лагранжевой двухточечной структурной функции по сравнению с [56] практически не оказывает влияния на статистику относительной скорости пары инерционных частиц, однако приводит к небольшому увеличению РФР.

После подстановки (5) в (4) и ограничения членами с пространственными производными первого порядка получим

$$\langle \Delta u'_i p \rangle = -\tau_p \left(F_{ik}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial P}{\partial w_k} + G_{ik}(\mathbf{r}, t) \frac{\partial P}{\partial r_k} \right), \quad (9)$$

$$F_{ij}(\mathbf{r}, t) = \frac{f_\sigma \Sigma_{ij} + f_\omega \Omega_{ij}}{\tau_p} + (l_\sigma \Sigma_{ik} + l_\omega \Omega_{ik}) \frac{\partial \Delta U_j}{\partial r_k} - \frac{1}{2} \left(f_{\sigma 1} \frac{D_p \Sigma_{ij}}{Dt} + f_{\omega 1} \frac{D_p \Omega_{ij}}{Dt} \right),$$

$$G_{ij}(\mathbf{r}, t) = g_\sigma \Sigma_{ij} + g_\omega \Omega_{ij}, \quad f_\zeta = \frac{1}{\tau_p} \int_0^\infty \Psi_\zeta(\tau) \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau, \quad g_\zeta = \frac{T_\zeta}{\tau_p} - f_\zeta,$$

$$f_{\zeta 1} = \frac{1}{\tau_p^2} \int_0^\infty \Psi_\zeta(\tau) \tau \exp\left(-\frac{\tau}{\tau_p}\right) d\tau, \quad l_\zeta = g_\zeta - f_{\zeta 1}, \quad T_\zeta = \int_0^\infty \Psi_\zeta(\tau) d\tau, \quad \zeta = \sigma, \omega.$$

Согласно (9) величины F_{ij} и G_{ij} могут быть интерпретированы как тензоры диффузии, описывающие транспорт двухчастичной ФПВ в фазовом пространстве (\mathbf{r}, \mathbf{w}) . Коэффициенты f_ζ , g_ζ , $f_{\zeta 1}$, l_ζ характеризуют вовлечение пары частиц в пульсационное движение турбулентной жидкости, т. е. они описывают связь между дисперсной и сплошной фазами. Подставляя (9) в (3), получаем замкнутое двухточечное кинетическое уравнение для двухчастичной ФПВ распределения относительной скорости пары частиц в однородной турбулентности:

$$\frac{\partial P}{\partial t} + w_i \frac{\partial P}{\partial r_i} + \frac{1}{\tau_p} \frac{\partial (\Delta U_i - w_i) P}{\partial w_i} = F_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial w_i \partial w_j} + G_{ij} \frac{\partial^2 P}{\partial w_i \partial r_j}. \quad (10)$$

Левая часть уравнения (10) описывает эволюцию во времени и конвекцию в фазовом пространстве, в то время как правая часть характеризует диффузионный перенос ФПВ в результате взаимодействия частиц с турбулентными вихрями. Таким образом, моделирование поля скорости турбулентной жидкости гауссовым случайным процессом позволяет выразить взаимодействие частиц с турбулентными вихрями в виде дифференциального оператора второго порядка.

Кинетическое уравнение (10) полностью описывает статистики поля относительной скорости пары частиц в однородной турбулентности. Интегрируя (10) по подпространству скорости \mathbf{w} , можно получить систему уравнений баланса для двухточечных статистических моментов относительной скорости двух частиц.

2.2. Уравнения для двухточечных статистических моментов ФПВ

Первые три момента, которые следуют из (10), имеют вид

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{\partial \Gamma W_i}{\partial r_i} = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial W_i}{\partial t} + W_j \frac{\partial W_i}{\partial r_j} = -\frac{\partial \Gamma S_{pij}}{\partial r_j} + \frac{\Delta U_{pi} - W_i}{\tau_p}, \quad (12)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_{pij}}{\partial t} + W_k \frac{\partial S_{pij}}{\partial r_k} + \frac{1}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma S_{pijk}}{\partial r_k} = & -\frac{D_{pij}^r}{\tau_p} \frac{\partial W_j}{\partial r_k} - \frac{D_{pij}^r}{\tau_p} \frac{\partial W_i}{\partial r_k} + \\ & + (l_\sigma \Sigma_{ik} + l_\omega \Omega_{ik}) \frac{\partial \Delta U_j}{\partial r_k} + (l_\sigma \Sigma_{jk} + l_\omega \Omega_{jk}) \frac{\partial \Delta U_i}{\partial r_k} + \\ & + \frac{2}{\tau_p} (f_\sigma \Sigma_{ij} + f_\omega \Omega_{ij} - S_{pij}) - f_{\sigma 1} \frac{D_p \Sigma_{ij}}{Dt} - f_{\omega 1} \frac{D_p \Omega_{ij}}{Dt}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\Gamma = \int P d\mathbf{w}, \quad W_i = \frac{1}{\Gamma} \int w_i P d\mathbf{w}, \quad S_{pij} = \langle w'_i w'_j \rangle = \frac{1}{\Gamma} \int (w_i - W_i)(w_j - W_j) P d\mathbf{w},$$

$$D_{pij}^r = \tau_p S_{pij} + \mathfrak{D}_{pij}^r, \quad \mathfrak{D}_{pij}^r = \tau_p G_{ij}^r = \tau_p (g_\sigma \Sigma_{ij} + g_\omega \Omega_{ij}).$$

Здесь Γ — РФР; W_i — осредненная относительная скорость двух частиц; S_{pij} — структурная функция скорости (СФС) частиц второго порядка; D_{pij}^r — тензор относительной диффузии двух частиц; \mathfrak{D}_{pij}^r — тензор относительной диффузии двух жидких элементов, движущихся вдоль траекторий инерционных частиц. СФС и РФР описывают соответственно статистику поля относительной скорости и статистическую неоднородность пространственного распределения двух частиц. Чтобы замкнуть систему уравнений, вытекающую из кинетического уравнения (10) на уровне вторых моментов, привлекается градиентная алгебраическая аппроксимация для тройных корреляций флуктуаций скорости. Эта аппроксимация получается из соответствующего дифференциального уравнения для тройных моментов ФПВ, если пренебречь членами, описывающими эволюцию во времени, конвекцию, порождение флуктуаций скорости вследствие градиентов осредненной скорости и привлечь квазигауссово представление для моментов четвертого порядка [36; 56]:

$$S_{pijk} = -\frac{1}{3} \left(D_{pin}^r \frac{\partial S_{pjik}}{\partial r_n} + D_{pin}^r \frac{\partial S_{pikj}}{\partial r_n} + D_{pkn}^r \frac{\partial S_{pij}}{\partial r_n} \right). \quad (14)$$

С учетом (9) относительная скорость жидкости, видимая частицами, определяется по формуле

$$\Delta U_{pi} = \frac{1}{\Gamma} \int \langle \Delta u_i p \rangle P d\mathbf{w} = \Delta U_i + \frac{1}{\Gamma} \int \langle \Delta u_i' p \rangle P d\mathbf{w} = \Delta U_i - \mathfrak{D}_{pij}^r \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial r_j}. \quad (15)$$

Тройные корреляции, появляющиеся в (8), аппроксимируются аналогичным (14) способом:

$$\Sigma_{ijk} = -\frac{1}{3} \left(\mathfrak{D}_{pin}^r \frac{\partial \Sigma_{jk}}{\partial r_n} + \mathfrak{D}_{pin}^r \frac{\partial \Sigma_{ik}}{\partial r_n} + \mathfrak{D}_{pkn}^r \frac{\partial \Sigma_{ij}}{\partial r_n} \right), \quad (16)$$

$$\Omega_{ijk} = -\frac{1}{3} \left(\mathfrak{D}_{pin}^r \frac{\partial \Omega_{jk}}{\partial r_n} + \mathfrak{D}_{pin}^r \frac{\partial \Omega_{ik}}{\partial r_n} + \mathfrak{D}_{pkn}^r \frac{\partial \Omega_{ij}}{\partial r_n} \right).$$

В изотропной турбулентности без учета силы тяжести имеет место сферическая симметрия, подразумевающая независимость относительных скоростей и плотности распределения пары частиц от пространственной ориентации вектора \mathbf{r} и зависимость их только от его модуля r . Векторы осредненных относительных скоростей жидкости и частиц в изотропной турбулентности могут быть выражены через свои радиальные компоненты:

$$\Delta U_i = \frac{r_i}{r} \Delta U_r, \quad W_i = \frac{r_i}{r} W_r. \quad (17)$$

Кроме того, в однородной изотропной турбулентности любой тензор второго ранга может быть представлен в виде

$$M_{ij}(\mathbf{r}, \tau) = M_{nn}(r, \tau) \delta_{ij} + [M_{ll}(r, \tau) - M_{nn}(r, \tau)] \frac{r_i r_j}{r^2}, \quad (18)$$

где M_{ll} и M_{nn} — продольная и поперечная по отношению к вектору \mathbf{r} компоненты тензора.

Таким образом, в изотропной турбулентности система уравнений (11)–(16) с учетом (17) и (18), а также соотношения $\Omega_{ll} = 0$ сводится к

$$\frac{\partial \Gamma}{\partial t} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} (r^2 W_r) = 0, \quad (19)$$

$$\frac{\partial W_r}{\partial t} + W_r \frac{\partial W_r}{\partial r} = \frac{2(S_{pnm} - S_{pll})}{r} - \frac{\partial \Gamma S_{pll}}{\partial r} + \frac{\Delta U_{pr} - W_r}{\tau_p}, \quad (20)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_{pll}}{\partial t} + W_r \frac{\partial S_{pll}}{\partial r} &= \frac{1}{r^2 \Gamma} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \Gamma D_{pll}^r \frac{\partial S_{pll}}{\partial r} \right) - \frac{4}{3r} \left[D_{pll}^r \frac{\partial S_{pnm}}{\partial r} + \frac{2}{r} D_{pnm}^r (S_{pll} - S_{pnm}) \right] - \\ &- f_{\sigma 1} \left[\frac{\partial \Sigma_{ll}}{\partial t} + \Delta U_{pr} \frac{\partial \Sigma_{ll}}{\partial r} - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \mathfrak{D}_{pll}^r \frac{\partial \Sigma_{ll}}{\partial r} \right) \right] + \\ &+ \frac{4}{3r} \left(\mathfrak{D}_{pll}^r \frac{\partial \Sigma_{nm}}{\partial r} + \frac{2}{r} \mathfrak{D}_{pnm}^r (\Sigma_{ll} - \Sigma_{nm}) \right) \Big] - \\ &- \frac{4f_{\omega 1}}{3r} \left(\mathfrak{D}_{pll}^r \frac{\partial \Omega_{nm}}{\partial r} - \frac{2\mathfrak{D}_{pnm}^r \Omega_{nm}}{r} \right) - \frac{2D_{pll}^r}{\tau_p} \frac{\partial W_r}{\partial r} + 2l_{\sigma} \Sigma_{ll} \frac{\partial \Delta U_r}{\partial r} + \frac{2}{\tau_p} (f_{\sigma} \Sigma_{ll} - S_{pll}), \quad (21) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S_{pnm}}{\partial t} + W_r \frac{\partial S_{pnm}}{\partial r} &= \frac{1}{3r^4 \Gamma} \left\{ \frac{\partial}{\partial r} \left(r^4 \Gamma D_{pll}^r \frac{\partial S_{pnm}}{\partial r} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial r} \left[r^3 \Gamma D_{pnm}^r (S_{pll} - S_{pnm}) \right] \right\} - \\ &- f_{\sigma 1} \left\{ \frac{\partial \Sigma_{nm}}{\partial t} + \Delta U_{pr} \frac{\partial \Sigma_{nm}}{\partial r} - \frac{1}{3r^4} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^4 \mathfrak{D}_{pll}^r \frac{\partial \Sigma_{nm}}{\partial r} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^3 \mathfrak{D}_{pnm}^r (\Sigma_{ll} - \Sigma_{nm}) \right) \right] \right\} - \\ &- f_{\omega 1} \left\{ \frac{\partial \Omega_{nm}}{\partial t} + \Delta U_{pr} \frac{\partial \Omega_{nm}}{\partial r} - \frac{1}{3r^4} \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(r^4 \mathfrak{D}_{pll}^r \frac{\partial \Omega_{nm}}{\partial r} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial r} \left(r^3 \mathfrak{D}_{pnm}^r \Omega_{nm} \right) \right] \right\} - \\ &- \frac{2D_{pnm}^r W_r}{\tau_p r} + \frac{2(l_{\sigma} \Sigma_{nm} + l_{\omega} \Omega_{nm}) \Delta U_r}{r} + \frac{2}{\tau_p} (f_{\sigma} \Sigma_{nm} + f_{\omega} \Omega_{nm} - S_{pnm}), \quad (22) \end{aligned}$$

$$D_{pll}^r = \tau_p S_{pll} + \mathfrak{D}_{pll}^r, \quad D_{pnm}^r = \tau_p S_{pnm} + \mathfrak{D}_{pnm}^r, \quad \mathfrak{D}_{pll}^r = \tau_p g_{\sigma} \Sigma_{ll},$$

$$\mathfrak{D}_{pnm}^r = \tau_p (g_{\sigma} \Sigma_{nm} + g_{\omega} \Omega_{nm}),$$

$$\Delta U_{pr} = \Delta U_r - \mathfrak{D}_{pll}^r \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial r}.$$

3. Частицы в стационарной изотропной турбулентности

Вначале рассмотрим двухточечную статистику поля скорости и кластеризацию (аккумуляцию) в стационарной суспензии частиц, помещенных в статистически однородное изотропное и стационарное турбулентное поле жидкости. В этом случае относительные скорости и распределение частиц могут зависеть только от расстояния r . Кроме того, принимается, что осредненный относительный конвективный перенос со скоростью среды отсутствует ($\Delta U_r = 0$), а полное число частиц не изменяется во времени. Последнее условие предполагает баланс потоков частиц, направленных внутрь и из начала координат, и, следовательно, равенство нулю осредненной относительной радиальной скорости W_r .

3.1. Основные уравнения

Таким образом, уравнение (19) удовлетворяется тождественно, а система уравнений (20)—(22) сводится к решению следующей задачи в безразмерных переменных:

$$\frac{2(\bar{S}_{pll} - \bar{S}_{pnn})}{\bar{r}} + \frac{d\bar{S}_{pll}}{d\bar{r}} + (\bar{S}_{pll} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}) \frac{d \ln \Gamma}{d\bar{r}} = 0, \quad (23)$$

$$\begin{aligned} \text{St}^2 \left\{ \frac{1}{\bar{r}^2 \Gamma} \frac{d}{d\bar{r}} \left[\bar{r}^2 \Gamma (\bar{S}_{pll} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}) \frac{d\bar{S}_{pll}}{d\bar{r}} \right] - \frac{4}{3\bar{r}} \left[(\bar{S}_{pll} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}) \frac{d\bar{S}_{pnn}}{d\bar{r}} + \right. \right. \\ \left. \left. + \frac{2}{\bar{r}} (\bar{S}_{pnn} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{nn} + g_\omega \bar{\Omega}_{nn}) (\bar{S}_{pll} - \bar{S}_{pnn}) \right] \right\} + \\ + \text{St}^2 f_{\sigma 1} \left\{ \frac{1}{\bar{r}^2 \Gamma} \frac{d}{d\bar{r}} \left(\bar{r}^2 \Gamma g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{d\bar{\Sigma}_{ll}}{d\bar{r}} \right) - \right. \\ \left. - \frac{4}{3\bar{r}} \left[g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{d\bar{\Sigma}_{mm}}{d\bar{r}} + \frac{2}{\bar{r}} (g_\sigma \bar{\Sigma}_{mm} + g_\omega \bar{\Omega}_{mm}) (\bar{\Sigma}_{ll} - \bar{\Sigma}_{mm}) \right] \right\} - \\ - \frac{4\text{St}^2 f_{\omega 1}}{3\bar{r}} \left[g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{d\bar{\Omega}_{mm}}{d\bar{r}} - \frac{2}{\bar{r}} (g_\sigma \bar{\Sigma}_{mm} + g_\omega \bar{\Omega}_{mm}) \bar{\Omega}_{mm} \right] + 2(f_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} - \bar{S}_{pll}) = 0, \quad (24) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \frac{\text{St}^2}{3\bar{r}^4\Gamma} \left\{ \frac{d}{d\bar{r}} \left[\bar{r}^4 \Gamma (\bar{S}_{pl} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}) \frac{d\bar{S}_{pml}}{d\bar{r}} \right] + \right. \\
 & + 2 \frac{d}{d\bar{r}} \left[\bar{r}^3 \Gamma (\bar{S}_{pml} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ml} + g_\omega \bar{\Omega}_{ml}) (\bar{S}_{pl} - \bar{S}_{pml}) \right] \left. \right\} + \\
 & + \frac{\text{St}^2 f_{\sigma 1}}{3\bar{r}^4} \left\{ \frac{3\bar{r}^4 g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}}{\Gamma} \frac{d\Gamma}{d\bar{r}} \frac{d\bar{\Sigma}_{ml}}{d\bar{r}} + \frac{d}{d\bar{r}} \left(\bar{r}^4 g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{d\bar{\Sigma}_{ml}}{d\bar{r}} \right) + \right. \\
 & + 2 \frac{d}{d\bar{r}} \left[\bar{r}^3 (g_\sigma \bar{\Sigma}_{ml} + g_\omega \bar{\Omega}_{ml}) (\bar{\Sigma}_{ll} - \bar{\Sigma}_{ml}) \right] \left. \right\} + \\
 & + \frac{\text{St}^2 f_{\omega 1}}{3\bar{r}^4} \left\{ \frac{3\bar{r}^4 g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}}{\Gamma} \frac{d\Gamma}{d\bar{r}} \frac{d\bar{\Omega}_{ml}}{d\bar{r}} + \frac{d}{d\bar{r}} \left(\bar{r}^4 g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{d\bar{\Omega}_{ml}}{d\bar{r}} \right) - \right. \\
 & - 2 \frac{d}{d\bar{r}} \left[\bar{r}^3 (g_\sigma \bar{\Sigma}_{ml} + g_\omega \bar{\Omega}_{ml}) \bar{\Omega}_{ml} \right] \left. \right\} + \\
 & + 2 (f_\sigma \bar{\Sigma}_{ml} + f_\omega \bar{\Omega}_{ml} - \bar{S}_{pml}) = 0. \tag{25}
 \end{aligned}$$

В (23)—(25) черта сверху обозначает безразмерные переменные, построенные при помощи колмогоровских масштабов длины η и скорости $u_k \equiv (v\varepsilon)^{1/4}$, а $\text{St} \equiv \tau_p / \tau_k$ обозначает число Стокса, построенное по колмогоровскому временному микромасштабу $\tau_k \equiv (v / \varepsilon)^{1/2}$. Число Стокса характеризует отклик частиц на микромасштабные пульсации поля скорости турбулентной жидкости. Уравнение (23) выражает баланс между силами миграции и диффузии в направлении между двумя частицами. Сила миграции определяется двумя первыми членами в (23), а сила диффузии описывается третьим членом в (23). Миграционный дрейф обусловлен притяжением частиц вследствие «турбофореза», обусловленного их взаимодействием с турбулентными вихрями. Этот механизм имеет много общего с традиционным турбофорезом в неоднородной турбулентности [34; 35]. Уравнения (24) и (25) выражают баланс радиальной S_{pl} и поперечной \bar{S}_{pml} компонент СФС $S_{p ij}$. Итак, в стационарной изотропной турбулентности без учета силы тяжести задача сводится к решению обыкновенных дифференциальных уравнений относительно РФР и продольной (радиальной) и поперечной СФС второго порядка.

Граничные условия для уравнений (23)—(25) задаются в виде

$$\frac{d\bar{S}_{pll}}{d\bar{r}} = \frac{d\bar{S}_{pnn}}{d\bar{r}} = 0 \text{ при } \bar{r} = \bar{d}, \quad (26)$$

$$\frac{d\bar{S}_{pll}}{d\bar{r}} = \frac{d\bar{S}_{pnn}}{d\bar{r}} = 0, \quad \Gamma = 1 \text{ при } \bar{r} \rightarrow \infty, \quad (27)$$

где $\bar{d} \equiv d / \eta$ — безразмерный диаметр частиц. Условия (26) — для описания упругих столкновений твердых сфер. Отметим, что в предыдущих наших работах [36; 41; 56] использовались условия (26) при $\bar{r} = 0$. Этот случай соответствует упругим столкновениям точечных частиц нулевого размера. Когда используются условия (26) при $\bar{r} = \bar{d}$, то принимается во внимание конечный размер частиц. Условия (27) отражают тот факт, что на больших расстояниях между частицами их СФС однородна некоррелированно, т. е. относительные скорости перестают зависеть от r , СФС однородна и частицы случайным образом (равномерно) распределены в пространстве.

В предположении, что относительная скорость пары частиц распределена по нормальному закону, соотношение между осредненной по модулю относительной скоростью и продольной СФС имеет вид

$$\langle |w_r| \rangle = \left(\frac{2}{\pi} \langle w_r'^2 \rangle \right)^{1/2} = \left(\frac{2}{\pi} S_{pll} \right)^{1/2}. \quad (28)$$

Как показано в [8], форма ФПВ относительной скорости зависит от инерционности частиц и только при больших числах Стокса является гауссовой. Тем не менее даже для безынерционных частиц величина $\langle |w_r| \rangle / \langle w_r'^2 \rangle^{1/2}$ согласно прямым численным расчетам [63] равняется 0,77, что достаточно близко к значению $\sqrt{2/\pi} = 0,798$, предсказываемому нормальным распределением. Поэтому далее величина $\langle |w_r| \rangle$ определяется на основе соотношения (28).

Для определения коэффициентов вовлечения f_ζ , g_ζ , $f_{\zeta 1}$ ($\zeta = \sigma, \omega$) в (23)—(25) необходимо задать автокорреляционные функции $\Psi_\zeta(\tau)$. Если, как и в [41; 56], использовать двухмасштабные биэкспоненциальные аппроксимации, аналогичные предложенной в [64], коэффициенты вовлечения примут вид

$$f_{\zeta} = \frac{2\Omega_{\zeta} + z^2}{2\Omega_{\zeta} + 2\Omega_{\zeta}^2 + z^2}, \quad g_{\zeta} = \frac{2\Omega_{\zeta} + z^2 - \Omega_{\zeta} z^2}{\Omega_{\zeta} (2\Omega_{\zeta} + 2\Omega_{\zeta}^2 + z^2)},$$

$$f_{\zeta 1} = \frac{(2\Omega_{\zeta} + z^2)^2 - 2\Omega_{\zeta}^2 z^2}{(2\Omega_{\zeta} + 2\Omega_{\zeta}^2 + z^2)^2}, \quad (29)$$

где $\Omega_{\zeta} \equiv \tau_p / T_{\sigma}$ — параметр инерционности частиц; $z \equiv \tau_T / T_L$ — отношение между тейлоровым дифференциальным и лагранжевым интегральным временными масштабами турбулентности. Эти временные масштабы определяются, как в [41]:

$$\tau_T = \left(\frac{2 \operatorname{Re}_{\lambda}}{15^{1/2} a_0} \right)^{1/2} \tau_k, \quad a_0 = \frac{a_{01} + a_{0\infty} \operatorname{Re}_{\lambda}}{a_{02} + \operatorname{Re}_{\lambda}}, \quad a_{02} = 205, \quad a_{0\infty} = 7,$$

$$T_L = \frac{2(\operatorname{Re}_{\lambda} + C_1) \tau_k}{15^{1/2} C_{0\infty}}, \quad C_{0\infty} = 7, \quad C_1 = 32, \quad \operatorname{Re}_{\lambda} = \left(\frac{15 u'^4}{\varepsilon \nu} \right)^{1/2},$$

где $\operatorname{Re}_{\lambda}$ — число Рейнольдса, основанное на тейлоровом пространственном микромасштабе; u' — среднеквадратичная интенсивность пульсаций скорости жидкости. Когда $\operatorname{Re}_{\lambda}$ возрастает ($z \rightarrow 0$), коэффициенты вовлечения (29) переходят в величины, соответствующие экспоненциальной автокорреляционной функции $\Psi_{\zeta}(\tau) = \exp(-\tau / T_{\zeta})$:

$$f_{\zeta} = \frac{1}{1 + \Omega_{\zeta}}, \quad g_{\zeta} = \frac{1}{\Omega_{\zeta} (1 + \Omega_{\zeta})}, \quad f_{\zeta 1} = \frac{1}{(1 + \Omega_{\zeta})^2}.$$

Согласно (7) в вязком пространственном интервале продольная и поперечная компоненты тензоров скоростей деформации и вращения и структурной функции представляются в виде

$$\bar{\Sigma}_{ll} = \frac{\bar{r}^2}{15}, \quad \bar{\Sigma}_{mm} = \frac{\bar{r}^2}{20}, \quad \bar{\Omega}_{ll} = 0, \quad \bar{\Omega}_{mm} = \frac{\bar{r}^2}{12}, \quad \bar{S}_{p ll} = \frac{\bar{r}^2}{15}, \quad \bar{S}_{p mm} = \frac{2\bar{r}^2}{15}, \quad (30)$$

а временные масштабы двухточечных корреляций тензоров скоростей деформации и вращения должны быть пропорциональны колмогоровскому микромасштабу τ_k :

$$\bar{T}_{\sigma} = A_{\sigma}, \quad \bar{T}_{\omega} = A_{\omega} \quad (31)$$

с постоянными значениями A_σ и A_ω . Согласно [65; 66] эти постоянные соответственно равны 2,3 и 7,2.

Во внешнем пространственном интервале, когда расстояние r превышает интегральный пространственный масштаб турбулентности, L , T_σ и T_ω переходят в традиционный лагранжев интегральный временной масштаб T_L . Далее примем, что в инерционном пространственном интервале ($\eta \ll r \ll L$) T_σ и T_ω совпадают и равняются лагранжеву двухточечному временному масштабу инкремента скорости T_{Lr} , определенному в [41] как $T_{Lr} = 0,3 \varepsilon^{-1/3} r^{2/3}$. Для непрерывного описания T_σ и T_ω во всем диапазоне расстояния между двумя точками r используется аппроксимация [56]:

$$\bar{T}_\zeta = \bar{T}_L \left[1 - \exp \left(- \left(\frac{A_2}{A_\zeta} \right)^{3/2} \bar{r} \right) \right]^{-2/3} \left(\frac{\bar{r}^4}{\bar{r}^4 + (\bar{T}_L / A_2)^6} \right)^{1/6},$$

$$A_\sigma = 2,3, \quad A_\omega = 7,2, \quad A_2 = 0,3. \quad (32)$$

Продольная компонента тензора деформации совпадает с соответствующей компонентой эйлеровой СФС жидкости и задается аппроксимацией [67]

$$\bar{\Sigma}_{ll} = \bar{S}_{ll} = \frac{2 \text{Re}_\lambda}{15^{1/2}} \left[1 - \exp \left(- \frac{\bar{r}}{(15C)^{3/4}} \right) \right]^{4/3} \times$$

$$\times \left(\frac{15^3 \bar{r}^4}{15^3 \bar{r}^4 + (2 \text{Re}_\lambda / C)^6} \right)^{1/6}, \quad C = 2,0, \quad (33)$$

которая подчиняется гипотезам подобия Колмогорова. В вязком пространственном интервале ($r \leq \eta$) поперечные компоненты Σ_{mn} и Ω_{mn} описываются соотношениями (30). Если $T_\sigma = T_\omega$, то Σ_{mn} и Ω_{mn} появляются в уравнениях в виде суммы, равной поперечной СФС ($\Sigma_{mn} + \Omega_{mn} = S_{mn}$). Поскольку $T_\sigma = T_\omega$ в инерционном и внешнем пространственных интервалах, достаточно определить только S_{mn} в этих интервалах. Поперечная СФС жидкости выражается через продольную СФС при помощи соотношения

$$S_{mn} = S_{ll} + \frac{r}{2} \frac{dS_{ll}}{dr}. \quad (34)$$

3.2. Малоинерционные частицы

Вначале построим решение уравнений (23)—(25) для малоинерционных частиц ($\bar{d} \ll 1$, $St < 1$). Следует отметить важность исследования закономерностей кластеризации малоинерционных частиц в атмосферных условиях. Это связано с тем, что достижимые к настоящему времени с использованием метода прямого численного моделирования и при лабораторных экспериментах числа Рейнольдса по крайней мере на порядок меньше типичных значений, реализуемых в атмосферных потоках. Кроме того, характерные для дождевых капель и атмосферных аэрозолей значения размеров и времен релаксации, отнесенные к соответствующим турбулентным микромасштабам, настолько малы, что их реализация представляет большие трудности как в DNS, так и в экспериментах. Будем решать уравнения (23)—(25) для точечных частиц в окрестности $r = 0$ без учета граничного условия (27). Это решение ищется в виде

$$\bar{S}_{pl} = \alpha_l \bar{r}^2, \quad \bar{S}_{pm} = \alpha_n \bar{r}^2, \quad (35)$$

$$\Gamma = C_\Gamma \bar{r}^\chi. \quad (36)$$

Подставляя (35) и (36) в (23)—(25) и учитывая (29)—(31), получаем систему уравнений для определения коэффициентов α_l , α_n и показателя степени χ :

$$\begin{aligned} 4\alpha_l - 2\alpha_n + \chi \left(\alpha_l + \frac{g_\sigma}{15} \right) &= 0, \\ St^2 \left\{ \alpha_l (\chi + 5) \left(\alpha_l + \frac{g_\sigma}{15} \right) - \frac{4}{3} \left[\alpha_n \left(\alpha_l + \frac{g_\sigma}{15} \right) + \left(\alpha_n + \frac{g_\sigma}{20} + \frac{g_\omega}{12} \right) (\alpha_l - \alpha_n) \right] \right\} &+ \\ + \frac{St^2 f_{\sigma 1}}{15} \left(\frac{\chi g_\sigma}{15} + \frac{g_\sigma}{4} - \frac{g_\omega}{36} \right) + \frac{St^2 f_{\omega 1}}{108} \left(g_\omega - \frac{g_\sigma}{5} \right) + \frac{f_\sigma}{15} - \alpha_l &= 0, \quad (37) \\ \frac{St^2 (\chi + 7)}{3} \left[\alpha_n \left(\alpha_l + \frac{g_\sigma}{15} \right) + \left(\alpha_n + \frac{g_\sigma}{20} + \frac{g_\omega}{12} \right) (\alpha_l - \alpha_n) \right] &+ \\ + St^2 f_{\sigma 1} \left[\frac{\chi g_\sigma}{300} + \frac{7}{720} \left(g_\sigma + \frac{g_\omega}{3} \right) \right] + St^2 f_{\omega 1} \left[\frac{\chi g_\sigma}{180} - \frac{7}{432} \left(g_\omega - \frac{g_\sigma}{5} \right) \right] &+ \\ + \frac{f_\sigma}{20} + \frac{f_\omega}{12} - \alpha_n &= 0, \end{aligned}$$

где согласно (29)

$$f_{\zeta} = \frac{A_{\zeta}^2 z^2 + 2A_{\zeta} St}{A_{\zeta}^2 z^2 + 2A_{\zeta} St + 2St^2}, \quad g_{\zeta} = \frac{A_{\zeta}^2 (A_{\zeta} z^2 + 2St - z^2 St)}{St (A_{\zeta}^2 z^2 + 2A_{\zeta} St + 2St^2)},$$

$$f_{\zeta 1} = \frac{A_{\zeta}^2 \left[(2St + A_{\zeta} z^2)^2 - 2z^2 St^2 \right]}{(A_{\zeta}^2 z^2 + 2A_{\zeta} St + 2St^2)^2}.$$

На рис. 1 показаны зависимости α_l , α_n и χ от St , полученные в результате решения системы алгебраических уравнений (37) для $Re_{\lambda} = 100$. Наиболее важной характеристикой с точки зрения анализа процесса кластеризации является показатель степени χ в (36), поскольку эта величина характеризует поведение РФР при малых расстояниях между частицами. Как видно из рис. 1, показатель степени χ отрицательный и, следовательно, РФР Γ сингулярна (т. е. стремится к бесконечности) при $r \rightarrow 0$. Для малоинерционных частиц степенной скейлинг Γ от \bar{r} с отрицательным показателем степени был найден ранее путем численных [7; 20; 21; 32; 37] и аналитических [9; 36; 37] исследований. Неограниченный рост РФР при стремлении расстояния между частицами к нулю может быть интерпретирован как явление кластеризации и принят в качестве критерия кластеризации, обусловленного притяжением частиц вследствие турбофореза. Из рис. 1 также видна неоднозначность решения уравнений (37) в некотором диапазоне изменения St . Второе решение соответствует большей абсолютной величине χ и, следовательно, большей сингулярности РФР. Однако второе решение вряд ли может быть реализовано физически. Самое важное, что действительные решения уравнений (37) и, следовательно, эффект кластеризации в указанном выше смысле имеют место только при $St < St_{cr}$, а не во всем диапазоне изменения числа Стокса. Итак, полученные результаты свидетельствуют, что решение уравнений (23)—(25), которое может быть представлено в виде (35) и (36), имеет место только при $St < St_{cr}$. Критическое число Стокса St_{cr} является точкой бифуркации: при $St > St_{cr}$ вместо (35) и (36) в окрестности $r = 0$ решение уравнений (23)—(25) имеют вид

$$\bar{S}_{pl}(\bar{r}) = \bar{S}_{pm}(\bar{r}) = \bar{S}_p(0), \quad \Gamma(\bar{r}) = \Gamma(0), \quad (38)$$

где значения $\bar{S}_p(0)$ и $\Gamma(0)$ зависят от St и Re_{λ} .

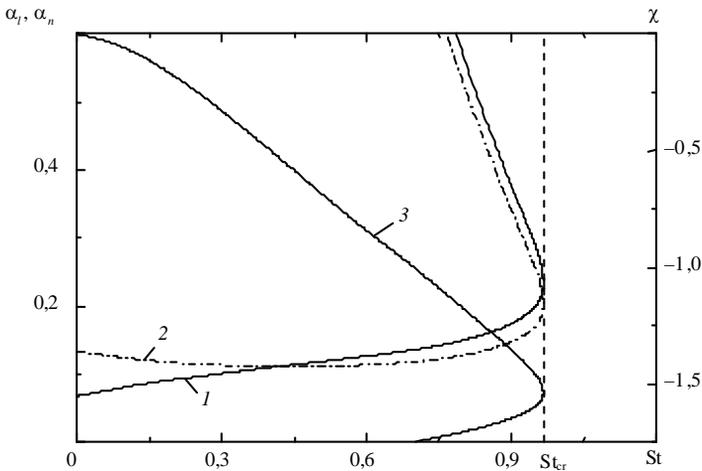


Рис. 1. Зависимости коэффициентов α_l (1), α_n (2) и показателя степени χ (3) от числа Стокса

В случае $St \ll 1$ решение уравнений (37) может быть найдено путем разложения в ряд по малому параметру St . Удерживая только первые члены разложения по St , получаем

$$\alpha_l = \frac{1}{15} + \left[\frac{2(2A_\sigma + A_o)}{135} - \begin{cases} 0 & \text{для } z^2 \gg St \\ (15A_\sigma)^{-1} & \text{для } z^2 \ll St \end{cases} \right] St,$$

$$\alpha_n = \frac{2}{15} + \left[\frac{7(A_\sigma - A_o)}{270} - \begin{cases} 0 & \text{для } z^2 \gg St \\ (20A_\sigma)^{-1} + (12A_o)^{-1} & \text{для } z^2 \ll St \end{cases} \right] St,$$

$$\chi = - \left[1 + \frac{5A_o}{3A_\sigma} - \begin{cases} 0 & \text{для } z^2 \gg St \\ 5(A_o - A_\sigma)/2A_\sigma^2 A_o & \text{для } z^2 \ll St \end{cases} \right] St^2. \quad (39)$$

Отрицательная квадратичная зависимость χ от St при $St \ll 1$ (т. е. $\chi \propto -St^2$) была впервые получена в [9] и позже воспроизведена в [36; 37]. Согласно уравнениям (37) χ зависит от St и Re_λ . Однако влияние числа Рейнольдса Re_λ на χ достаточно слабое, поскольку не учитывается явление перемежаемости турбулентности. В то же время χ сильно зависит от значений постоянных A_σ и A_o . Если принять $A_\sigma = A_o$, то, как сле-

дует из (39), $\chi = -8St^2 / 3$ при $St \ll 1$ для не очень малых значений Re_λ , когда $z^2 \gg St$. Однако, как следует из прямых численных расчетов [21; 37], $|\chi|/St^2$ имеет значительно бóльшие значения при $St \ll 1$, чем $8/3$. Такие большие значения $|\chi|/St^2$ могут быть получены, если A_ω значительно превышает A_σ . Если принять $A_\sigma = 2,3$ и $A_\omega = 7,2$, то $|\chi|/St^2 = 6,22$, что сопоставимо со значениями, даваемыми в [21; 37] при $St \ll 1$. Таким образом, для достижения согласия с данными DNS для степенной зависимости χ от St необходимо, чтобы временной масштаб корреляции тензора вращения A_ω превышал соответствующий масштаб тензора деформации A_σ .

Коэффициенты СФС α_i , α_n и показатель степени РФР χ являются функциями двух параметров: St и Re_λ . Однако, как уже указывалось, влияние Re_λ , предсказываемое решением уравнений (37), достаточно слабое. Поэтому при $St < 0,6$ и $Re_\lambda > 30$ коэффициент α_i и показатель степени χ , полученные в результате решения уравнений (37) при $A_\sigma = 2,3$ и $A_\omega = 7,2$, могут быть аппроксимированы следующим образом:

$$\alpha_i = \frac{1}{15} + 0,16St - 0,21St^2 + 0,18St^3, \quad (40)$$

$$\chi = -6St^2 + 9,8St^3 - 6,2St^4. \quad (41)$$

На рис. 2 представлено сравнение χ с данными DNS [37] для $Re_\lambda = 47$ и [55] для $Re_\lambda = 83$, а также с экспериментальными и численными данными [32], полученными в диапазоне изменения Re_λ от 108 до 149. Видно, что показатель степени χ , предсказываемый решением уравнений (37), слабо зависит от Re_λ и может быть достаточно хорошо описан аппроксимацией (41). Предсказываемые значения χ находятся в очень хорошем согласии с DNS [37], однако они превышают полученные в [32] значения и недооценивают результаты, полученные в [55] для относительно больших чисел Стокса. На рис. 2 также представлены теоретическая зависимость [37]

$$\chi = -6,56St^2 \quad (42)$$

и аппроксимация [68], обобщающая данные прямого численного моделирования [21; 55]:

$$\chi = -\frac{0,75St^2}{0,1+St^3}. \quad (43)$$

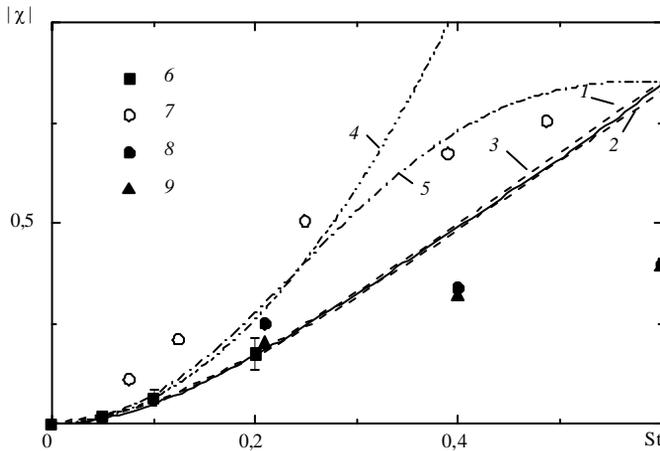


Рис. 2. Влияние числа Стокса на показатель степени в зависимости (36):

1 и 2 — решения уравнений (37) для $Re_\lambda = 30$ и $Re_\lambda = \infty$; 3, 4, 5 — формулы (41), (42) и (43); 6 — DNS [37]; 7 — DNS [55]; 8 — эксперимент [32]; 9 — DNS [32]

Как видно, формулы (42) и (43) достаточно хорошо коррелируют с предсказываемым решением уравнений (37) при $St \leq 0,1$, однако переоценивают последнее при $St > 0,1$.

Отметим, что постоянная интегрирования C_T в (36) не может быть определена из решения уравнений (23)—(25) при малых значениях r без учета граничных условий (27). C_T может быть найдена путем сопряжения (36) с полным решением уравнений (23)—(25), учитывающим граничные условия (26) и (27).

3.3. Частицы произвольной инерционности

Рассмотрим решение задачи (23)—(27) при больших числах Рейнольдса ($Re_\lambda \rightarrow \infty$) в инерционном пространственном интервале ($\eta \ll r \ll L$) для частиц, время релаксации которых принадлежит инерционному временному интервалу ($\tau_k \ll \tau_p \ll T_L$). В рассматриваемом пределе задача (23)—(27) с учетом (29) и (32)—(34) трансформируется в следующую задачу:

$$\begin{aligned}
 & \frac{2(\sigma_{pll} - \sigma_{pnn})}{\rho} + \frac{d\sigma_{pll}}{d\rho} + (\sigma_{pll} + g_r \sigma_{ll}) \frac{d \ln \Gamma}{d\rho} = 0, \\
 & \frac{1}{\rho^2 \Gamma} \frac{d}{d\rho} \left[\rho^2 \Gamma (\sigma_{pll} + g_r \sigma_{ll}) \frac{d\sigma_{pll}}{d\rho} \right] - \frac{4}{3\rho} \left[(\sigma_{pll} + g_r \sigma_{ll}) \frac{d\sigma_{pnn}}{d\rho} + \right. \\
 & \left. + \frac{2}{\rho} (\sigma_{pnn} + g_r \sigma_{nn}) (\sigma_{pll} - \sigma_{pnn}) \right] + f_{r1} \left\{ \frac{1}{\rho^2 \Gamma} \frac{d}{d\rho} \left(\rho^2 \Gamma g_r \sigma_{ll} \frac{d\sigma_{ll}}{d\rho} \right) - \right. \\
 & \left. - \frac{4}{3\rho} \left[g_r \sigma_{ll} \frac{d\sigma_{nn}}{d\rho} + \frac{2}{\rho} g_r \sigma_{nn} (\sigma_{ll} - \sigma_{nn}) \right] \right\} + 2(f_r \sigma_{ll} - \sigma_{pll}) = 0, \quad (44) \\
 & \frac{1}{3\rho^4 \Gamma} \left\{ \frac{d}{d\rho} \left[\rho^4 \Gamma (\sigma_{pll} + g_r \sigma_{ll}) \frac{d\sigma_{pnn}}{d\rho} \right] + 2 \frac{d}{d\rho} \left[\rho^3 \Gamma (\sigma_{pnn} + g_r \sigma_{nn}) (\sigma_{pll} - \sigma_{pnn}) \right] \right\} + \\
 & + \frac{f_{r1}}{3\rho^4} \left\{ \frac{3\rho^4 g_r \sigma_{ll}}{\Gamma} \frac{d\Gamma}{d\rho} \frac{d\sigma_{nn}}{d\rho} + \frac{d}{d\rho} \left(\rho^4 g_r \sigma_{ll} \frac{d\sigma_{nn}}{d\rho} \right) + 2 \frac{d}{d\rho} \left[\rho^3 g_r \sigma_{nn} (\sigma_{ll} - \sigma_{nn}) \right] \right\} + \\
 & + 2(f_r \sigma_{nn} - \sigma_{pnn}) = 0, \\
 & \rho = 0 \quad \frac{d\sigma_{pll}}{d\rho} = \frac{d\sigma_{pnn}}{d\rho} = 0; \quad \rho \rightarrow \infty \quad \sigma_{pnn} = f_r \sigma_{ll}, \quad \sigma_{pnn} = f_r \sigma_{nn}, \quad \Gamma = 1, \\
 & \sigma_{ll} = C\rho^{2/3}, \quad \sigma_{nn} = \frac{4}{3} C\rho^{2/3}, \quad f_r = \frac{A_2 \rho^{2/3}}{1 + A_2 \rho^{2/3}}, \quad g_r = \frac{A_2^2 \rho^{4/3}}{1 + A_2 \rho^{2/3}}, \\
 & f_{r1} = \frac{A_2^2 \rho^{4/3}}{(1 + A_2 \rho^{2/3})^2}, \\
 & \rho = \frac{\bar{r}}{St^{3/2}}, \quad \sigma_{pll} = \frac{\bar{S}_{pll}}{St}, \quad \sigma_{pnn} = \frac{\bar{S}_{pnn}}{St}, \quad \sigma_{ll} = \frac{\bar{S}_{ll}}{St}, \quad \sigma_{nn} = \frac{\bar{S}_{nn}}{St}.
 \end{aligned}$$

Задача (44) является автомодельной относительно числа Стокса. На рис. 3 показаны продольная и поперечная СФС и РФР частиц, полученные из решения (44).

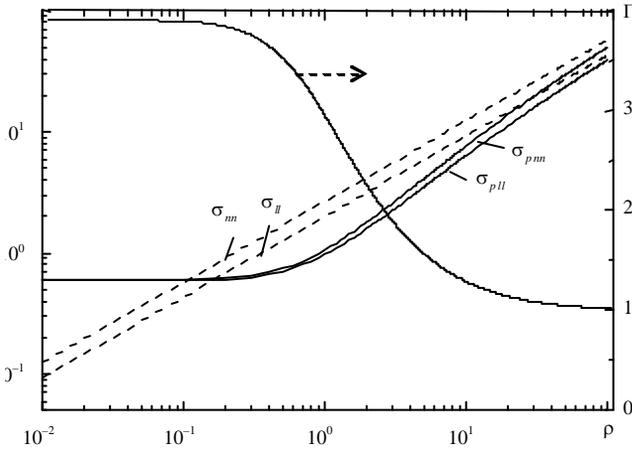


Рис. 3. Структурные и радиальная функции в инерционном пространственном интервале при $Re_\lambda \rightarrow \infty$

Видно, что при больших расстояниях ($\rho \gg 1$) продольная и поперечная СФС частиц меньше соответствующих СФС жидкости и могут быть выражены при помощи локально-равновесных соотношений: $\sigma_{pll} = f_r \sigma_{ll}$ и $\sigma_{pnn} = f_r \sigma_{nn}$. Однако при малых значениях ρ продольная и поперечная СФС частиц превышают соответствующие СФС жидкости. Этот эффект обусловлен диффузионным переносом пульсаций скорости инерционных частиц. Как видно из рис. 3, с уменьшением ρ значения σ_{pll} и σ_{pnn} сближаются, а РФР монотонно стремится к конечному значению. При $\rho = 0$ получаются следующие значения:

$$\sigma_{pll}(0) = \sigma_{pnn}(0) = 0,59, \quad \Gamma(0) = 3,9. \quad (45)$$

Для высокоинерционных частиц, время релаксации которых много больше лагранжева интегрального масштаба турбулентности ($\tau_p \gg T_L$), могут быть получены простые асимптотические решения задачи (23)—(27). Благодаря интенсивному диффузионному переносу пульсаций скорости продольная и поперечная СФС совпадают и становятся однородными, а РФР равняется единице:

$$\bar{S}_{pll} = \bar{S}_{pnn} = \frac{2\bar{T}_L Re_\lambda}{15^{1/2} St}, \quad \Gamma = 1. \quad (46)$$

Решения задачи (23)—(27) с учетом (29) и (32)—(34) получены численно с использованием трехдиагональной матричной процедуры. На рис. 4 представлены полученные распределения структурных и радиальных функций частиц нулевого ($\bar{d} = 0$) и конечного ($\bar{d} = 0,1$) размера при различных числах Стокса. Видно, что с увеличением St структурные функции частиц отклоняются от структурных функций жидкости (кривые 1) и приближаются к асимптотическим однородным распределениям для высокоинерционных частиц (46). В отличие от СФС жидкости, которые равны нулю при $\bar{r} = 0$, СФС достаточно инерционных частиц благодаря диффузионному переносу отличаются от нуля в начале координат. Значения \bar{S}_{pij} частиц конечного размера превышают соответствующие значения точечных частиц, однако разница между ними имеет место только при небольших расстояниях r для не очень инерционных частиц и исчезает с ростом St . Как видно из рис. 4в, РФР малоинерционных точечных частиц сингулярна при $\bar{r} = 0$. Это означает, что имеет место кластеризация, обусловленная миграционным дрейфом вследствие градиента пульсаций инкремента скорости в радиальном направлении. Миграционный дрейф приводит к аккумулярованию частиц на небольших расстояниях между ними и, следовательно, действует аналогично дополнительной силе притяжения.

При относительно больших числах Стокса сингулярность РФР исчезает, и в соответствии с (38) Γ приобретает постоянное значение в $\bar{r} = 0$. Отметим, что значение St_{cr} , полученное из решения задачи (23)—(27), несколько больше по сравнению с предсказываемым уравнениями решением (37).

В пределе $St \rightarrow \infty$ РФР стремится к единице. РФР частиц конечного размера меньше соответствующего значения для частиц нулевого размера. Следовательно, эффект аккумулярования уменьшается с ростом размера частиц, однако влияние размера частиц исчезает с увеличением числа Стокса.

Сопряжение (36) с решением задачи (23)—(27) при малых \bar{r} дает следующее значение C_Γ для $A_\sigma = 2,3$ и $A_0 = 7,2$:

$$C_\Gamma = 1 + 12St^2 \text{ при } St < 0,6 \text{ и } Re_\lambda > 30. \quad (47)$$

Соотношение (47) не учитывает влияние числа Re_λ , поскольку оно не является существенным для малоинерционных частиц. Отметим, что (47) напоминает соотношение $\Gamma = 1 + 18St^2$, полученное в [8] путем аппроксимации данных DNS для малоинерционных частиц при $\bar{r} = 1$.

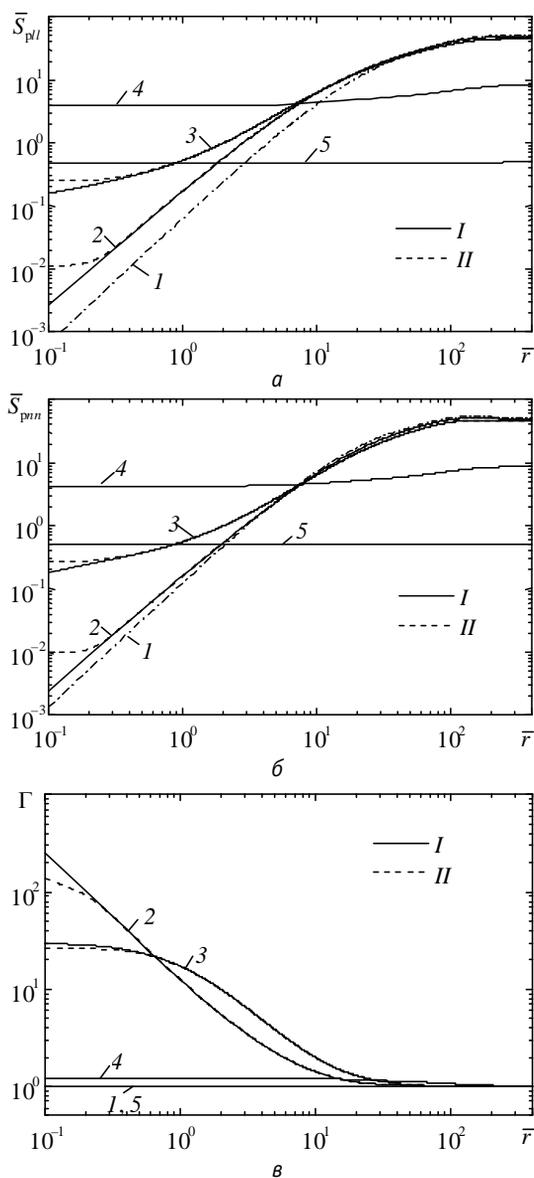


Рис. 4. Продольная (а) и поперечная (б) СФС и РФР (в) частиц нулевого (I) и конечного (II) размеров при $Re_\lambda = 100$:

1 — $St = 0$, 2 — $St = 1$, 3 — $St = 2$, 4 — $St = 50$, 5 — $St = 1000$

Исследуем адекватность модели (23)—(27) для предсказания статистики скорости частиц в однородной изотропной турбулентности. С этой целью сравним эти предсказания с результатами прямых расчетов [8; 69]. В [8] выполнено лагранжево моделирование движения частиц размера $\bar{d} = 1$ в замороженной турбулентности после того, как стационарное состояние было достигнуто и частицы были введены в поток. В [69] было исследовано движение частиц размером $\bar{d} = 0,92$ в стационарной форсированной турбулентности.

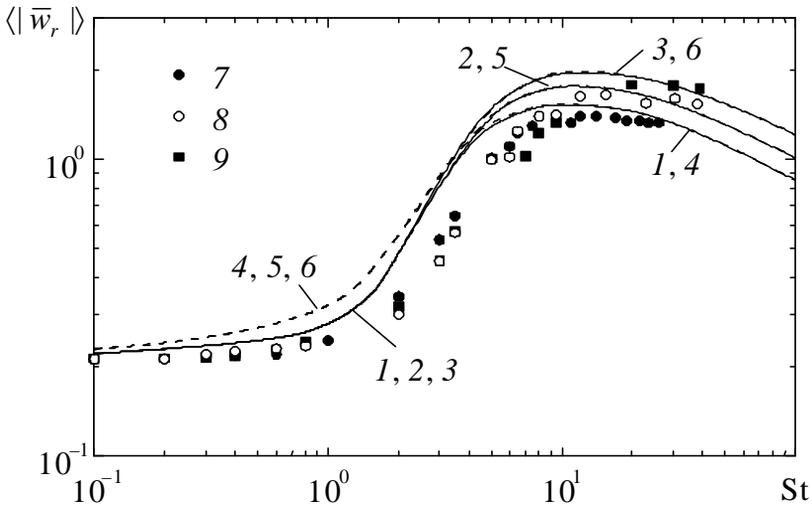


Рис. 5. Влияние инерционности частиц на осредненную абсолютную относительную скорость для $\bar{r} = 1$:

1—3 — модель при $\bar{d} = 0$; 4—6 — модель при $\bar{d} = 1$; 7—9 — DNS [8];
 1, 4, 7 — $Re_\lambda = 45$; 2, 5, 8 — $Re_\lambda = 58$; 3, 6, 9 — $Re_\lambda = 75$

На рис. 5 показано влияние инерционности частиц на $\langle |\bar{w}_r | \rangle$ в широком диапазоне изменений числа Стокса. Предсказываемая осредненная абсолютная относительная скорость в точке контакта частиц определяется с использованием соотношения (28) для продольной СФС. Видно, что предсказываемые нашей моделью и прямым численным моделированием результаты следуют одинаковым тенденциям и указывают на существование максимума $\langle |\bar{w}_r | \rangle$ как функции St . Первоначальный рост $\langle |\bar{w}_r | \rangle$ с увеличением St связан с уменьшением коррелированности движения частиц.

Последующее падение $\langle |\bar{w}_r| \rangle$ с ростом St после достижения максимума объясняется уменьшением интенсивности пульсаций скорости, поскольку частицы слабее вовлекаются в турбулентное движение жидкости.

Из рис. 5 ясно, что предсказываемые моделью значения $\langle |\bar{w}_r| \rangle$ при $\bar{d} = 1$ превышают соответствующие значения для точечных частиц, а также результаты DNS при малых числах Стокса. Однако, как уже упоминалось, разница в предсказываемых значениях $\langle |\bar{w}_r| \rangle$ для частиц нулевого и конечного размеров исчезает при больших числах St .

На рис. 6 сравниваются результаты предсказаний кинетической энергии частиц, отнесенной к кинетической энергии жидкости ($k_p/k = 15^{1/2} \bar{S}_{pII}(\infty)/2 Re_\lambda$), и осредненной вариации радиальной относительной скорости, нормированной на кинетическую энергию частиц ($\langle w_r'^2(\bar{r}) \rangle/k_p = 4 \bar{S}_{pII}(\bar{r})/3 \bar{S}_{pII}(\infty)$), с данными DNS [69] для $Re_\lambda = 34$.

Как видно из рис. 6а, наша модель хорошо описывает падение кинетической энергии с ростом инерционности частиц без какого-либо влияния их размера. На рис. 6б показано разумное согласие модели с прямыми расчетами интенсивности пульсаций радиальной относительной скорости. На рис. 6б линией 4 представлена безразмерная вариация радиальной относительной скорости, соответствующая продольной СФС жидкости в вязком пространственном интервале (30):

$$\frac{\langle w_r'^2(\bar{r}) \rangle}{k_p} = \frac{2\bar{r}^2}{3 \cdot 15^{1/2} Re_\lambda}. \quad (48)$$

Несколько лучшее согласие предсказываемой нашей моделью зависимости относительной скорости двух частиц с данными DNS [69] по сравнению с [8] может быть объяснено различием между форсированной и замороженной турбулентностью, в которую вводятся частицы.

Далее сравним РФР, предсказываемую моделью (23)—(27), с прямыми численными и экспериментальными данными [8; 32]. На рис. 7 видно хорошее согласие РФР, предсказываемой для малоинерционных частиц конечного размера, с результатами измерений и прямого численного моделирования [32]. Для малоинерционных частиц число Стокса и безразмерный диаметр частиц связаны соотношением

$$St = \frac{\rho_p \bar{d}^2}{18 \rho_f}, \quad (49)$$

соответствующим стоксову закону обтекания частицы (ρ_p и ρ_f — плотности материала частиц и жидкости).

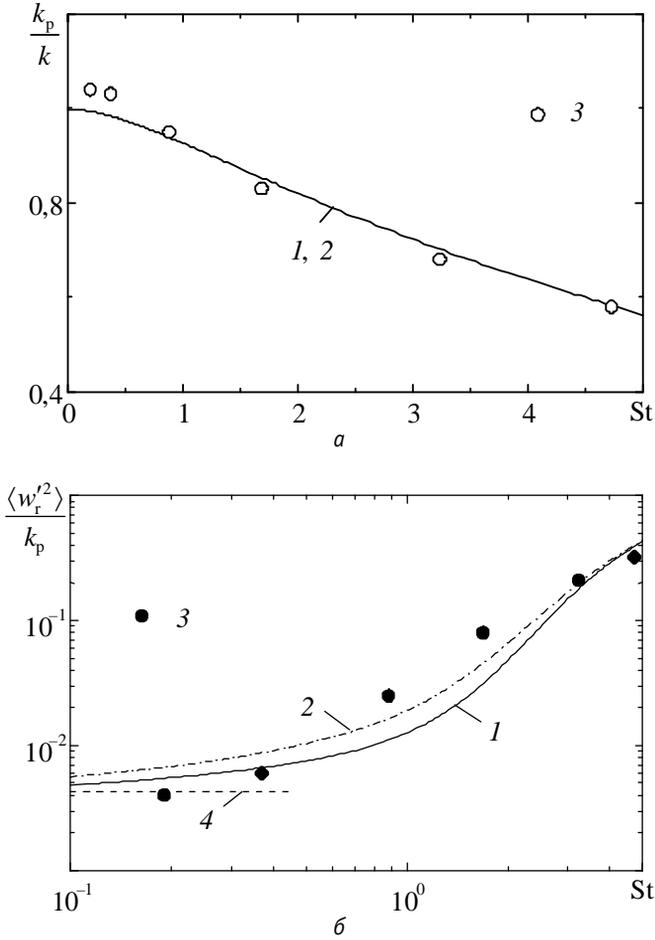


Рис. 6. Влияние инерционности частиц на кинетическую энергию (а) и интенсивность пульсаций радиальной относительной скорости частиц для $\bar{r} = 0,92$ (б):
 1 — модель при $\bar{d} = 0$, 2 — модель при $\bar{d} = 0,92$, 3 — DNS [69], 4 — (48)

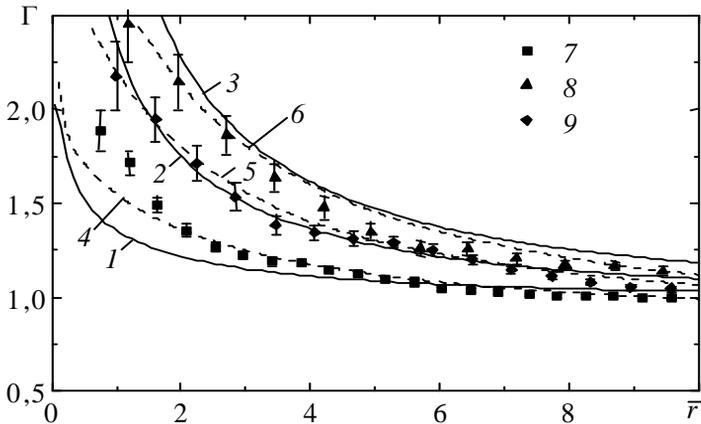


Рис. 7. РФР малоинерционных частиц:
 1—3 — модель; 4—6 — DNS [32]; 7—9 — эксперимент [32]; 1, 4, 7 — $St = 0,21$,
 $Re_\lambda = 108$; 2, 5, 8 — $St = 0,4$, $Re_\lambda = 134$; 3, 6, 9 — $St = 0,6$, $Re_\lambda = 147$

На рис. 8 показано влияние инерционности частиц конечного размера $\bar{d} = 1$ в точке контакта $\bar{r} = 1$ на РФР по сравнению с данными DNS [8]. Как и ожидалось, в предельных случаях $St \rightarrow 0$ и $St \rightarrow \infty$ частицы распределены в пространстве статистически однородно, а $\Gamma = 1$. С ростом числа Стокса РФР проходит через максимум. Следовательно, существует время релаксации частиц, при котором имеет место их максимальное аккумуляция. Это время релаксации примерно соответствует колмогоровскому временному масштабу турбулентности.

На рис. 8 демонстрируется качественное согласие результатов, даваемых нашей моделью и полученных прямым численным моделированием, хотя модель предсказывает не такой сильный эффект числа Re_λ и небольшой сдвиг максимума Γ в сторону больших значений St по сравнению с результатами DNS.

На основе сравнения с прямыми численными и экспериментальными результатами можно сделать вывод, что модель (23)—(27) в состоянии описать главные особенности статистики относительной скорости и аккумуляции частиц в стационарной изотропной турбулентности.

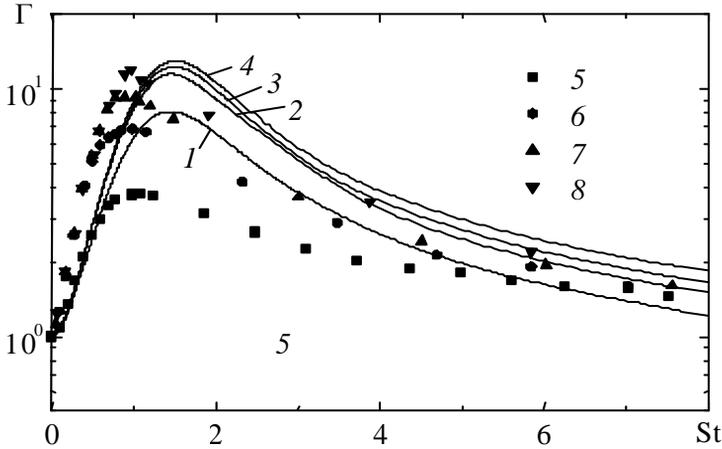


Рис. 8. Влияние инерционности частиц на РФП для $\bar{r} = 1$:
 1—4 — модель; 5—8 — DNS [8]; 1, 5 — $Re_\lambda = 24$; 2, 6 — $Re_\lambda = 45$;
 3, 7 — $Re_\lambda = 58$; 4, 8 — $Re_\lambda = 75$

В заключение отметим тесную связь представленной двухточечной статистической теории с теоретическим формализмом, основанным на разложении поля скорости дисперсной фазы в турбулентном потоке на «коррелированную» и «некоррелированную» составляющие [17; 24]. Поскольку дисперсная фаза одновременно обладает свойствами континуума и дискретных частиц, эти две составляющие интерпретируются в рамках эйлера и лагранжева методов моделирования. Первая (коррелированная) составляющая учитывает пространственную коррелированность движения частиц, а вторая (некоррелированная) представляет собой составляющую скорости, обусловленную статистически независимым движением частиц. В соответствии с этим формализмом кинетическая энергия частиц представляется в виде суммы

$$k_p = \tilde{k}_p + \delta k_p, \quad (50)$$

где \tilde{k}_p и δk_p — коррелированная и некоррелированная составляющие энергии. Эти части кинетической энергии частиц выражаются через двухточечные СФС частиц:

$$\tilde{k}_p = \frac{S_{pji}(\infty) - S_{pji}(0)}{4}, \quad \delta k_p = \frac{S_{pji}(0)}{4}. \quad (51)$$

На рис. 9 показано влияние инерционности частиц на коррелированную и некоррелированную составляющие энергии, нормированные на их полную кинетическую энергию. Видно, что соотношения (51) хорошо описывают результаты прямых расчетов [24]. Основной вклад в кинетическую энергию малоинерционных частиц дает коррелированная составляющая, а роль некоррелированной составляющей возрастает по мере увеличения инерционности частиц. Таким образом, движение высокоинерционных частиц в турбулентном потоке статистически независимо и подобно поведению броуновских частиц.

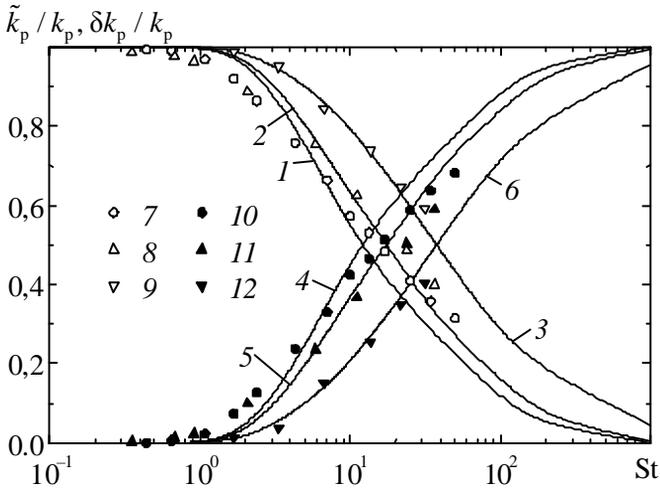


Рис. 9. Влияние инерционности частиц на коррелированную (1—3, 7—9) и некоррелированную (4—6, 10—12) составляющие кинетической энергии частиц: 1—6 — модель; 7—12 — DNS [24]; 1, 4, 7, 10 — $Re_\lambda = 52$; 2, 5, 8, 11 — $Re_\lambda = 67$; 3, 6, 9, 12 — $Re_\lambda = 134$

4. Частицы в нестационарной изотропной турбулентности

В этом разделе покажем возможности двухточечной статистической теории для описания поведения частиц в нестационарной однородной изотропной турбулентности. С целью упрощения анализа будем рассматривать РФР как квазистационарную и только СФС будем трактовать как истинно нестационарную. Это упрощение основано на слабой чувствительности СФС-частиц к изменению РФР. В то же время РФР сильно зависит от

каких-либо изменений СФС. Принятое допущение делает возможным свести систему уравнений (19)—(22) к следующей системе:

$$\frac{2(\bar{S}_{pll} - \bar{S}_{pnn})}{\bar{r}} + \frac{\partial \bar{S}_{pll}}{\partial \bar{r}} + (\bar{S}_{pll} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}) \frac{\partial \ln \Gamma}{\partial \bar{r}} = 0, \quad (52)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{S}_{pll}}{\partial \bar{t}} = & \text{St} \left\{ \frac{1}{\bar{r}^2 \Gamma} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left[\bar{r}^2 \Gamma (\bar{S}_{pll} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}) \frac{\partial \bar{S}_{pll}}{\partial \bar{r}} \right] - \frac{4}{3\bar{r}} \left[(\bar{S}_{pll} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}) \frac{\partial \bar{S}_{pnn}}{\partial \bar{r}} + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{2}{\bar{r}} (\bar{S}_{pnn} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{nn} + g_\omega \bar{\Omega}_{nn}) (\bar{S}_{pll} - \bar{S}_{pnn}) \right] \right\} + \text{St} f_{\sigma 1} \left\{ \frac{1}{\bar{r}^2 \Gamma} \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r}^2 \Gamma g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{\partial \bar{\Sigma}_{ll}}{\partial \bar{r}} \right) - \right. \\ & \left. - \frac{4}{3\bar{r}} \left[g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{\partial \bar{\Sigma}_{nn}}{\partial \bar{r}} + \frac{2}{\bar{r}} (g_\sigma \bar{\Sigma}_{nn} + g_\omega \bar{\Omega}_{nn}) (\bar{\Sigma}_{ll} - \bar{\Sigma}_{nn}) \right] \right\} - \frac{4 \text{St} f_{\omega 1}}{3\bar{r}} \left[g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{\partial \bar{\Omega}_{nn}}{\partial \bar{r}} - \right. \\ & \left. - \frac{2}{\bar{r}} (g_\sigma \bar{\Sigma}_{nn} + g_\omega \bar{\Omega}_{nn}) \bar{\Omega}_{nn} \right] + \frac{2(f_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} - \bar{S}_{pll})}{\text{St}}, \quad (53) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{S}_{pnn}}{\partial \bar{t}} = & \frac{\text{St}}{3\bar{r}^4 \Gamma} \left\{ \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left[\bar{r}^4 \Gamma (\bar{S}_{pll} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}) \frac{\partial \bar{S}_{pnn}}{\partial \bar{r}} \right] + \right. \\ & \left. + \frac{\text{St} f_{\omega 1}}{3\bar{r}^4} \left\{ \frac{3\bar{r}^4 g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{r}} \frac{\partial \bar{\Omega}_{nn}}{\partial \bar{r}} + \right. \right. \\ & \left. \left. + 2 \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left[\bar{r}^3 \Gamma (\bar{S}_{pnn} + g_\sigma \bar{\Sigma}_{nn} + g_\omega \bar{\Omega}_{nn}) (\bar{S}_{pll} - \bar{S}_{pnn}) \right] \right\} + \frac{\text{St} f_{\sigma 1}}{3\bar{r}^4} \left\{ \frac{3\bar{r}^4 g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll}}{\Gamma} \frac{\partial \Gamma}{\partial \bar{r}} \frac{\partial \bar{\Sigma}_{nn}}{\partial \bar{r}} + \right. \\ & \left. + \frac{d}{d\bar{r}} \left(\bar{r}^4 g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{\partial \bar{\Sigma}_{nn}}{\partial \bar{r}} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left[\bar{r}^3 (g_\sigma \bar{\Sigma}_{nn} + g_\omega \bar{\Omega}_{nn}) (\bar{\Sigma}_{ll} - \bar{\Sigma}_{nn}) \right] \right\} + \\ & \left. + \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left(\bar{r}^4 g_\sigma \bar{\Sigma}_{ll} \frac{\partial \bar{\Omega}_{nn}}{\partial \bar{r}} \right) - 2 \frac{\partial}{\partial \bar{r}} \left[\bar{r}^3 (g_\sigma \bar{\Sigma}_{nn} + g_\omega \bar{\Omega}_{nn}) \bar{\Omega}_{nn} \right] \right\} + \\ & \left. + \frac{2(f_\sigma \bar{\Sigma}_{nn} + f_\omega \bar{\Omega}_{nn} - \bar{S}_{pnn})}{\text{St}}. \quad (54) \end{aligned}$$

Аналогично (23)—(25) уравнения (52)—(54) нормализованы при помощи колмогоровских микромасштабов, используя начальную скорость диссипации ε_0 . Система уравнений (52)—(54) отличается от (23)—(25) только наличием временных производных от структурных функций в уравнениях (53) и (54). Начальные условия записываются как

$$\bar{S}_{pll} = \bar{S}_{pll}^0(\bar{r}), \quad \bar{S}_{pmm} = \bar{S}_{pmm}^0(\bar{r}) \quad \text{при } \bar{t} = 0, \quad (55)$$

где $\bar{S}_{pll}^0(\bar{r})$ и $\bar{S}_{pmm}^0(\bar{r})$ — заданные начальные распределения.

Граничные условия для уравнений (52)—(54) по-прежнему задаются соотношениями (26) и (27). Коэффициенты вовлечения в (52)—(54) определяются формулами (29). Лагранжевы двухточечные временные масштабы и СФС жидкости описываются выражениями (32)—(34) с учетом изменения характеристик турбулентности во времени.

Решения уравнений (52)—(54) с граничными и начальными условиями (26), (27), (55) сравниваются с результатами прямого численного моделирования [70] коррелированной и некоррелированной составляющих кинетической энергии частиц в затухающей изотропной турбулентности. Начальные значения для скоростей частиц в [70] принимались равными значениям скорости жидкости в точках расположения частиц. Поэтому начальные распределения для СФС в (55) полагались равными соответствующим распределениям в турбулентной жидкости, т. е. $\bar{S}_{pll}^0(\bar{r}) = \bar{S}_{ll}^0(\bar{r})$ и $\bar{S}_{pmm}^0(\bar{r}) = \bar{S}_{mm}^0(\bar{r})$.

На рис. 10 показана эволюция во времени распределений продольной СФС и РФР частиц, число Стокса которых, определенное по начальному значению колмогоровского временного микромасштаба, равнялось 2,2.

На рис. 11 представлено изменение во времени коррелированной и некоррелированной составляющих кинетической энергии частиц, рассчитанных на основании соотношений (51). Кинетическая энергия жидкости уменьшается во времени благодаря вязкой диссипации. Из рис. 10а видно, что этой же тенденции следует кинетическая энергия частиц.

Данные рис. 11 свидетельствуют, что имеют место два характерных периода изменения статистических характеристик частиц во времени, граница между которыми соответствует экстремальным значениям представленных на рис. 11 величин.

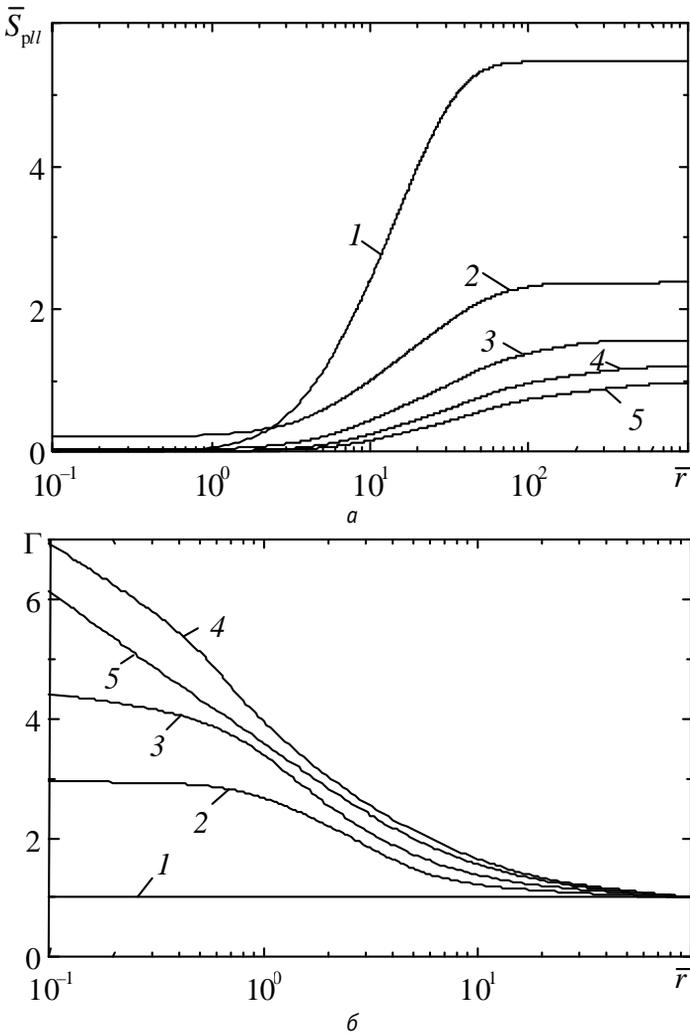


Рис. 10. Продольная СФС (а) и РФР (б) в разные моменты времени:
 1 — $\bar{t} = 0$, 2 — $\bar{t} = 5$, 3 — $\bar{t} = 10$, 4 — $\bar{t} = 15$, 5 — $\bar{t} = 20$

Первый (начальный) период характеризуется развитием СФС и РФР от соответствующих распределений для турбулентной жидкости до квазистационарных распределений $\bar{S}_{p||}$ и Γ . Во втором (квазистационарном) пе-

риоде СФС и РФР описываются квазистационарными распределениями \bar{S}_{rij} и Γ , соответствующими мгновенным значениям чисел St и Re_λ . Инерционность частиц, характеризуемая числом Стокса, со временем падает, поскольку возрастает временной микромасштаб τ_k ; Re_λ также уменьшается. Максимальная неоднородность в статистическом распределении частиц достигается при $St \approx 1$ (кривая 4 на рис. 10б).

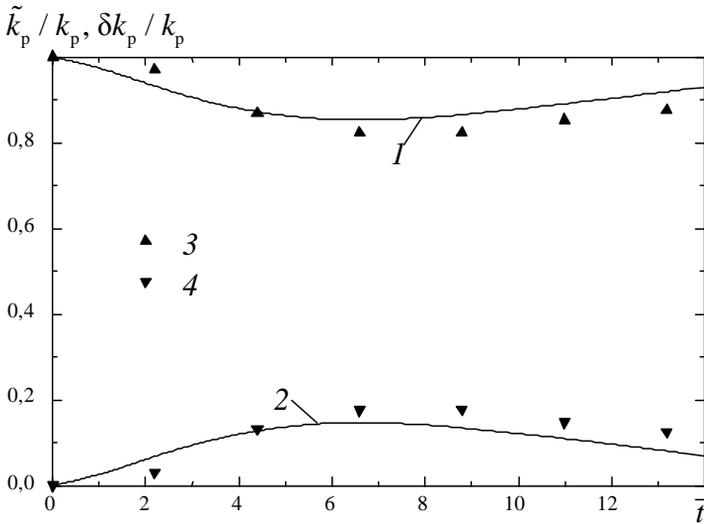


Рис. 11. Изменение во времени коррелированной (1, 3) и некоррелированной (2, 4) составляющих кинетической энергии частиц: 1, 2 — модель; 3, 4 — DNS [66]

Как видно из рис. 11, благодаря инерции скорости частиц становятся частично некоррелированными, и отношение $\delta k_p / k_p$ начинает расти. Однако после достижения максимума некоррелированная компонента кинетической энергии частиц снижается вследствие уменьшения числа Стокса (в соответствии с результатами для статистически стационарной турбулентности, приведенными на рис. 9). Значения коррелированной и некоррелированной составляющих кинетической энергии частиц, предсказываемые моделью (52)—(54), находятся в хорошем согласии с данными DNS [70].

Дальнейшая часть статьи посвящена приложениям представленной статистической теории дисперсии и аккумуляции инерционных частиц в однородной турбулентности.

5. Скорость столкновений частиц

Рассмотрим влияние инерционности частиц на скорость столкновений без учета эффектов гравитационного оседания и гидродинамического взаимодействия. В этом случае так называемое ядро столкновений (коагуляции) двух одинаковых частиц в турбулентном потоке определяется соотношением [7; 8]

$$\beta = 2\pi d^2 \langle |w_r(d)| \rangle \Gamma(d). \quad (56)$$

Согласно (56) турбулентное ядро столкновений управляется осредненной радиальной относительной скоростью и РФР. Взаимодействие инерционных частиц с турбулентными вихрями вызывает два физических явления, определяющих частоту столкновений: появление относительной скорости между соседними частицами (турбулентный транспортный эффект) и неоднородное распределение частиц в пространстве (эффект аккумулярования). С учетом соотношения (28), основанного на гауссовом распределении радиальной относительной скорости, ядро столкновений (56) примет вид

$$\beta = [8\pi S_{pl}(d)]^{1/2} d^2 \Gamma(d). \quad (57)$$

Подстановка (35) и (36) в (57) дает ядро столкновений для малоинерционных частиц:

$$\beta = (8\pi\alpha_j)^{1/2} C_T \bar{d}^{3+\chi} \frac{\eta^3}{\tau_k}. \quad (58)$$

Формула (58) справедлива для малоинерционных частиц, когда выполняются соотношения (35) и (36), т. е. при $St < St_{cr}$. В предельном случае безынерционных частиц (58) переходит в известное ядро [71]

$$\beta_{ST} = \left(\frac{8\pi}{15}\right)^{1/2} \frac{d^3}{\tau_k}. \quad (59)$$

На рис. 12 показано поведение ядра столкновений (58) с учетом (40), (41) и (47) в зависимости от числа Стокса. Виден монотонный рост β начиная от значения, даваемого формулой (59) при $St = 0$. Предсказываемое формулой (58) поведение β в зависимости от числа St и безразмерного диаметра частиц \bar{d} согласуется с данными прямого численного моделирования [72] для малоинерционных частиц. На рис. 12 также представлено ядро столкновений [68]

$$\beta = \left(\frac{8\pi}{15}\right)^{1/2} \frac{d^3}{\tau_k} \left[\Gamma(\bar{d}) + (2,7\pi)^{1/2} \exp\left(-\frac{1,7}{St}\right) \right], \quad \Gamma(\bar{d}) = \left(\frac{\bar{d}}{6}\right)^\chi, \quad (60)$$

полученное с учетом так называемых эффектов аккумуляции и петли. В (60) РФР определяется согласно (43). Формула (60) находится в достаточно хорошем согласии с зависимостью (58) и данными DNS [72].

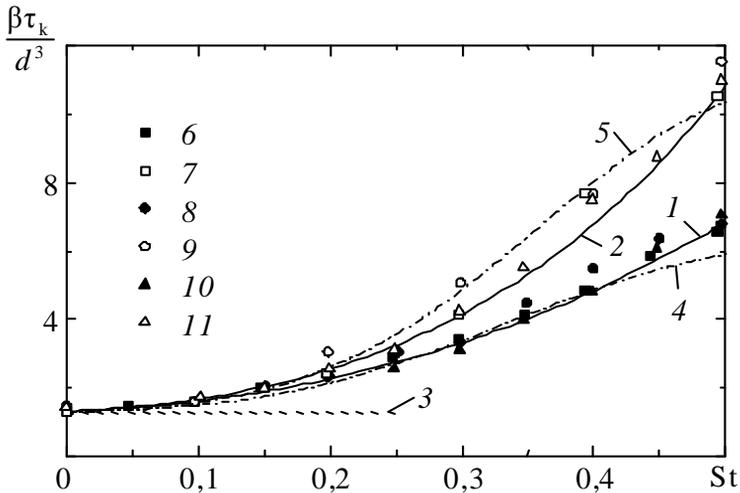


Рис. 12. Влияние числа Стокса на ядро столкновений малоинерционных частиц: 1, 2 — (58); 3 — (59); 4, 5 — (60); 1, 4, 6, 8, 10 — $\bar{d} = 1$; 2, 5, 7, 9, 11 — $\bar{d} = 0,5$; 6—11 — DNS [72]; 6, 7 — $Re_\lambda = 45$; 8, 9 — $Re_\lambda = 59$; 10, 11 — $Re_\lambda = 75$

Очевидно, что ядро столкновений (58) с учетом (40), (41) и (47), так же как и (60) с учетом (43), игнорирует эффект перемежаемости турбулентности. Это согласуется со слабой чувствительностью РФР к изменению числа Рейнольдса, установленной при малых значениях числа Стокса и расстояниях между двумя точками в DNS [20]. Отсутствие влияния Re_λ вытекает из классических гипотез подобия Колмогорова для мелкомасштабной турбулентности. Однако этот факт противоречит достаточно сильному росту показателя степени χ с увеличением Re_λ при малых St , что было получено в DNS [21]. Следовательно, вопрос о чувствительности РФР и ядра столкновений малоинерционных частиц к числу Рейнольдса требует дальнейшего исследования.

В реализуемом при больших числах Рейнольдса инерционном интервале изменения времени релаксации частиц ($1 \ll St \ll \bar{T}_L$) ядро столкновений (57) с учетом решения задачи (44) приводится к виду

$$\beta = a(\varepsilon\tau_p)^{1/2} d^2, \quad a = (8\pi\sigma_{pII}(0))^{1/2} \Gamma(0) = 15,0, \quad (61)$$

где постоянная a определена с учетом (45).

Высокоинерционные частицы ($St \gg \bar{T}_L$) движутся статистически независимо друг от друга и однородно распределены в пространстве. Следовательно, СФС и РФР таких частиц не зависят от расстояния между ними и равны

$$S_{pII} = \frac{4k_p}{3}, \quad \Gamma = 1. \quad (62)$$

Подстановка (62) в (57) приводит к известному ядру столкновений [73]

$$\beta_A = 4 \left(\frac{2\pi k_p}{3} \right)^{1/2} d^2 = 4 \left(\frac{2\pi f_u k}{3} \right)^{1/2} d^2, \quad (63)$$

$$f_u = \frac{2\Omega_L + z^2}{2\Omega_L + 2\Omega_L^2 + z^2}, \quad \Omega_u = \frac{\tau_p}{T_L},$$

где f_u — коэффициент вовлечения частиц в турбулентное движение.

В предельных случаях безынерционных и высокоинерционных частиц ядро столкновений управляется исключительно турбулентным транспортным механизмом. Согласно (61) механизм аккумуляции становится достаточно существенным, если время релаксации частиц принадлежит инерционному интервалу. Однако наиболее существенно влияние аккумуляции на скорость столкновений (и тем самым на коагуляцию) проявляется при совпадении (или близких значениях) времени релаксации частиц и временного колмогоровского микромасштаба турбулентности, когда радиальная функция распределения достигает максимума.

На рис. 13 показано ядро столкновений, полученное на основе модели (57) с учетом решения задачи (23)—(27), при широком изменении числа Стокса. Ядро столкновений β отнесено к соответствующей величине для безынерционных частиц (59) и сравнивается с данными DNS [8], полученными для $\bar{d} = 1$. Видно, что теоретическая модель воспроизводит выявленные в DNS тенденции поведения β , хотя предсказываемые значения ядра столкновений превышают результаты прямых расчетов.

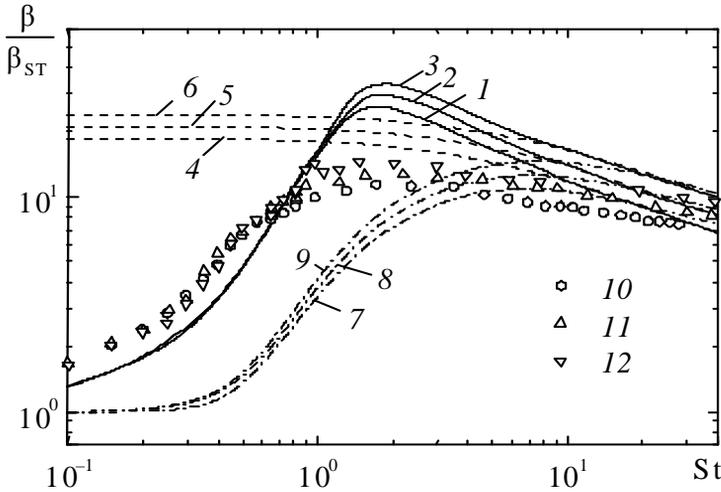


Рис. 13. Влияние инерционности частиц на ядро столкновений для $\bar{d} = 1$: 1—3 — модель; 4—6 — (63); 7—9 — (64); 10—12 — DNS [8]; 1, 4, 7, 10 — $Re_\lambda = 45$; 2, 5, 8, 11 — $Re_\lambda = 58$; 3, 6, 9, 12 — $Re_\lambda = 75$

Как следует из рис. 13, влияние числа Рейнольдса нивелируется для малоинерционных частиц, и ядро столкновений хорошо обобщается при использовании колмогоровских микромасштабов, поскольку обусловлено взаимодействием частиц с мелкомасштабной турбулентностью. Напротив, ядро столкновений высокоинерционных частиц управляется крупномасштабными вихрями и, следовательно, зависит от макромасштабов турбулентности. С ростом числа Стокса β приближается к ядру столкновений (63). На рис. 13 также изображена аппроксимация [54]

$$\beta = \beta_{ST} + \exp\left(-\frac{2}{St}\right)\beta_A, \quad (64)$$

которая учитывает образование каустик, но не принимает во внимание эффект аккумуляции частиц. Ясно, что аппроксимация (64) существенно недооценивает β при $St \sim 1$. Кроме того, в [8] путем обобщения данных DNS получены корреляционные зависимости для радиальной относительной скорости и РФР; после подстановки этих корреляций в (56) получается ядро столкновений, которое находится в очень хорошем согласии с результатами прямого численного моделирования при умеренных числах Рейнольдса.

6. Влияние кластеризации на скорость седиментации частиц

В [1] впервые было обнаружено, что скорость гравитационной седиментации тяжелых частиц в однородной турбулентности V_s может превышать соответствующую величину в нетурбулентной покоящейся среде V_t . Повышение скорости седиментации благодаря турбулентности установлено также в прямых численных [4; 74] и экспериментальных [75; 76] исследованиях. Этот эффект был связан с «преимущественным выметанием» частиц в область опускного движения жидкости. Эти численные и экспериментальные исследования относятся к разреженным суспензиям при очень малых значениях объемной концентрации дисперсной фазы, когда гидродинамическое взаимодействие частиц или образование кластеров не играет существенной роли.

В [13] было выполнено экспериментальное исследование седиментации в достаточно широком диапазоне изменения концентрации частиц. Было обнаружено дополнительное увеличение скорости седиментации V_s по сравнению со случаем разреженной суспензии V_{s0} , причем это увеличение $\Delta V_s \equiv V_s - V_{s0}$ было примерно линейным с ростом объемной концентрации частиц Φ , а максимальное значение V_s соответствовало числу Стокса, близкому к единице. Авторы [13] предположили, что увеличение $\Delta V_s \equiv V_s - V_{s0}$ происходит благодаря эффекту кластеризации частиц, и предложили простую феноменологическую модель для описания этого явления. Результаты прямого численного моделирования [38; 39] подтверждают линейную зависимость ΔV_s от Φ при небольших значениях объемной концентрации частиц и тем самым поддерживают гипотезу [13] о роли кластеров в увеличении гравитационной седиментации в турбулентной среде.

Ниже представлена статистическая модель влияния кластеризации на увеличение скорости седиментации частиц ΔV_s . Модель основана на теории Бэтчелора [77], предложенной для гравитационной седиментации взаимодействующих частиц в нетурбулентной среде.

6.1. Скорость седиментации, обусловленная кластеризацией частиц

Согласно [13] скорость седиментации частиц в турбулентной среде представляется в виде суммы двух слагаемых:

$$V_s = V_{s0} + \Delta V_s. \quad (65)$$

Здесь первое слагаемое характеризует скорость седиментации одиночных (изолированных) частиц в турбулентной жидкости при $\Phi \rightarrow 0$. Этот член равняется скорости седиментации в покоящейся среде V_1 и дополнительно повышению за счет эффекта преимущественного выметания. Второе слагаемое учитывает увеличение скорости седиментации в результате кластеризации частиц.

При малой объемной концентрации частиц

$$\Delta V_s = S\Phi V_1, \quad (66)$$

где S — коэффициент седиментации. Для определения S в (66) привлечем формулу Бэтчелора [77], согласно которой

$$S = \int_2^{\infty} \left[(A_{11} + A_{12} + 2B_{11} + 2B_{12} - 3)\Gamma - \frac{3}{\rho} \right] \rho^2 d\rho - 5, \quad (67)$$

где $\rho \equiv r/a$ — расстояние между центрами двух частиц, нормированное на их радиус $a \equiv d/2$. Хотя первоначально формула (67) была предложена для суспензии частиц в нетурбулентной среде, она справедлива и в турбулентной жидкости, если учитывается влияние турбулентности на РФР. Величины A_{11} , A_{12} , B_{11} , B_{12} обозначают функции подвижности пары частиц от расстояния между ними ρ и характеризуют гидродинамическое взаимодействие двух частиц. Подробные разложения функций подвижности при малых и больших расстояниях между частицами ρ приведены в [78]. При больших расстояниях ($\rho \rightarrow \infty$) имеет место асимптотическое разложение

$$A_{11} + A_{12} + 2B_{11} + 2B_{12} = 3 + \frac{3}{\rho} - \frac{15}{4\rho^4} + O(\rho^{-6}). \quad (68)$$

Кроме того, согласно [79]

$$S = \int_2^{\infty} \left(A_{11} + A_{12} + 2B_{11} + 2B_{12} - 3 - \frac{3}{\rho} \right) \rho^2 d\rho = -1,55. \quad (69)$$

С учетом соотношений (68) и (69) коэффициент седиментации (66) удобно представить в виде

$$S = S_1 + S_2 - 5, \quad (70)$$

$$S_1 = \int_2^{\infty} \left(A_{11} + A_{12} + 2B_{11} + 2B_{12} - 3 - \frac{3}{\rho} \right) \Gamma \rho^2 d\rho, \quad S_2 = 3 \int_2^{\infty} (\Gamma - 1) \rho d\rho. \quad (71)$$

В соответствии с (71) S_1 непосредственно учитывает вклад гидродинамического взаимодействия двух частиц, описываемого функциями подвижности. Из (68) ясно, что если размер частиц много меньше пространственного колмогоровского микромасштаба ($d \ll \eta$), то гидродинамическое взаимодействие является короткодействующим, поскольку его роль может быть существенной только на расстояниях порядка размера частиц. Напротив, величина S_2 непосредственно не зависит от гидродинамического взаимодействия, и его роль может проявляться только косвенно через влияние на Γ . Без учета гидродинамического взаимодействия РФР описывает взаимодействие частиц с турбулентными вихрями, которое может приводить к их кластеризации. Турбулентное взаимодействие является дальнедействующим, поскольку, как видно из рис. 4в и рис. 7, размер неоднородности в радиальном распределении пары частиц имеет порядок 10η . Кроме того, поскольку из этих рисунков следует, что $\Gamma > 1$, то выполняются неравенства $S_1 < 0$ и $S_2 > 0$.

Последнее слагаемое в (70) обусловлено опускным движением вытесненного частицей объема жидкости, а также увлечением жидкости в результате вязкого взаимодействия с падающей частицей. Из условия, что средний по горизонтальной плоскости поток жидкости равняется нулю, должен возникнуть обратный направленный вверх поток жидкости, чтобы компенсировать опускной поток, обусловленный падающими частицами. Этот обратный поток жидкости и приводит к появлению отрицательного члена $-5\Phi V_t$ в скорости седиментации [79]. Как показано ниже, в турбулентной среде за исключением случая очень малых значений числа Стокса имеет место соотношение $S_2 \gg |S_1 - 5|$. Это означает, что основной вклад в коэффициент седиментации определяется величиной S_2 , а роль величины S_1 , непосредственно зависящей от гидродинамического взаимодействия двух частиц, незначительна. Поэтому представляется возможным при расчете коэффициента седиментации использовать для РФР результаты, полученные без учета гидродинамического взаимодействия. Вносимая этим предположением в Γ погрешность проявляется только на расстояниях $\bar{r} = O(\bar{d})$, и, следовательно, погрешность в величине S , определяемую интегрированием по всей области \bar{r} , может быть существенной только при очень малых значениях числа Стокса. Следует также отметить, что используемая статистическая модель для Γ не учитывает эффект седиментации частиц. Это допущение, по-видимому, строго справедливо только для одинаковых частиц, находящихся в нетурбулентной среде [77], поскольку их движение в этом случае некоррелировано. Вопрос о необходимости учета влияния силы тяжести на радиальную функцию одинаковых частиц в турбулентной среде является открытым [44; 47; 48] и выходит за рамки данной работы.

6.2. Малоинерционные частицы

Вначале рассмотрим гравитационную седиментацию частиц в пределе, когда их динамическая инерционность стремится к нулю ($St \rightarrow 0$). В этом случае роль гидродинамического взаимодействия и погрешность, связанная с учетом его влияния на радиальную функцию распределения, являются максимальными. Безынерционные частицы полностью вовлекаются в турбулентное движение жидкости, их распределение в пространстве без учета гидродинамического взаимодействия подобно распределению пассивной примеси, и, следовательно, $\Gamma = 1$. Тогда из (66) и (69)—(71) следует результат, полученный Бэтчелором для седиментации частиц в нетурбулентной жидкости [79]:

$$\Delta V_s = -6,55\Phi V_t. \quad (72)$$

Согласно (72) скорость седиментации равномерно распределенного в пространстве коллектива частиц меньше скорости падения одиночной частицы. Этот коллективный эффект обусловлен обратным потоком жидкости, препятствующим гравитационной седиментации частиц. Однако, как показано в [66], гидродинамическое взаимодействие приводит к появлению дрейфа безынерционных частиц друг к другу в однородном изотропном турбулентном поле. В результате этого дрейфа наблюдается рост РФР при сближении частиц и возникает сингулярность в Γ при $\rho \rightarrow 2$. Поэтому в однородной изотропной турбулентности Γ описывается таким же радиальным распределением, как и в ламинарном линейном поле скорости [80]:

$$\Gamma = \frac{1}{1-A} \exp \left[-3 \int_{\rho}^{\infty} \frac{(A-B) d\rho_1}{(1-A)\rho_1} \right], \quad (73)$$

где A и B — монотонно падающие функции от расстояния между частицами ρ [81]. РФР быстро убывает с ростом ρ , и для $\rho \rightarrow 2$ имеет место асимптотическое решение [66]

$$\Gamma = \frac{0,21}{\xi^{0,78} (\ln \xi^{-1})^{0,29}}, \quad \xi = \rho - 2.$$

Подстановка (73) в (70) и (71) дает

$$S_1 = -1,7, \quad S_2 = 2,7, \quad S = -4,0,$$

и, следовательно,

$$\Delta V_s = -4\Phi V_t. \quad (74)$$

Сравнение (74) с (72) показывает, что учет влияния гидродинамического взаимодействия на радиальную функцию распределения приводит к некоторому увеличению скорости седиментации, однако скорость седиментации коллектива безынерционных частиц по-прежнему меньше скорости падения одной частицы. Таким образом, эффект кластеризации безынерционных частиц, обусловленный их гидродинамическим взаимодействием, оказывается недостаточно значительным, чтобы полностью компенсировать препятствующее седиментации воздействие обратного потока жидкости.

Для оценки эффекта кластеризации малоинерционных частиц на скорость седиментации используем соотношения (36), (41), (47) для РФР. Хотя эти соотношения справедливы для $\bar{r} \leq 1$, они будут использоваться при больших значениях \bar{r} , поскольку полученные таким образом результаты представляют интерес только для качественного анализа. С этой целью определим радиус кластера r_{cl} как значение r , где РФР, описываемый соотношениями (36), (41) и (47), становится равен единице. Определенный таким образом радиус кластера определяется из соотношения

$$\bar{r}_{cl} = (1 + 12St^2)^{-1/\chi}. \quad (75)$$

Подстановка (36), (41) и (47) в (71) дает

$$S_1 = (1 + 12St^2) \bar{a}^\chi I(St),$$

$$I(St) = \int_0^{\infty} \left(A_{11} + A_{12} + 2B_{11} + 2B_{12} - 3 - \frac{3}{\rho} \right) \rho^{2+\chi} d\rho, \quad (76)$$

$$S_2 = \frac{3}{\bar{a}^2} \int_{2\bar{a}}^{\infty} (\Gamma - 1) \bar{r} d\bar{r} \approx \frac{3|\chi| \bar{r}_{cl}^2}{2(2+\chi) \bar{a}^2}. \quad (77)$$

При вычислении (77) учтено, что $\bar{r}_{cl} \gg \bar{a}$. На рис. 14 представлены зависимости S_1 и S_2 от числа St , построенные по формулам (76) и (77) с учетом (49) и (75) для разных отношений плотностей частиц и жидкости ρ_p / ρ_f . Видно, что для тяжелых частиц ($\rho_p / \rho_f \geq 10^3$) величина S_1 дает вклад в коэффициент седиментации S только при очень малых значениях числа Стокса, и уже при $St = 0,01$ ее роль пренебрежимо мала. Таким образом, при $\rho_p / \rho_f \geq 10^3$ в диапазоне $0,01 < St < 0,6$ скорость седиментации кластеров может быть оценена при помощи соотношения

$$\Delta V_s = b \Phi V_t \frac{\bar{r}_{cl}^2}{\bar{a}^2}, \quad b = \frac{3|\chi|}{2(2+\chi)}. \quad (78)$$

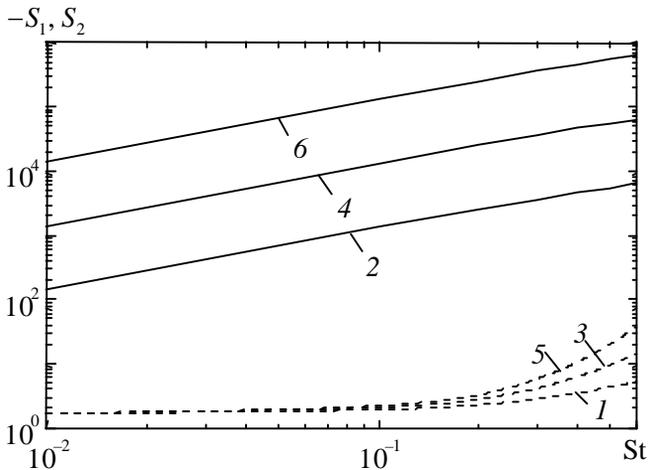


Рис. 14. Влияние числа Стокса на S_1 (1—3) и S_2 (4—6) для малоинерционных частиц:

1, 4 — $\rho_p / \rho_f = 10^2$; 2, 5 — $\rho_p / \rho_f = 10^3$; 3, 6 — $\rho_p / \rho_f = 10^4$

Интересно, что выражение (78) совпадает с формулой для ΔV_s , даваемой феноменологической моделью [13], за исключением значения коэффициента b , который вместо функциональной зависимости от числа St согласно (78) в [13] принимается равным 0,3—0,5. Модель [13] основана на балансе силы тяжести и силы вязкого сопротивления применительно к движению кластерной квазичастицы. Сила тяжести пропорциональна r_{cl}^3 , а сила сопротивления в предположении о стоковом режиме обтекания квазичастицы пропорциональна r_{cl} , что и приводит в [13] к зависимости $\Delta V_s \sim r_{cl}^2$. В настоящей работе эта зависимость основана на теории Бэтчелора [77].

6.3. Частицы произвольной инерционности

Представим результаты вычисления коэффициента седиментации для достаточно инерционных частиц ($St > 0,1$). В этом случае основной вклад в коэффициент седиментации (70) дает величина S_2 , а влиянием гидродинамического взаимодействия частиц на радиальную функцию распределения можно пренебречь. Таким образом, из (70) и (71) получается, что

$$S \approx \frac{12}{d^2} \int_0^{\infty} (\Gamma - 1) \bar{r} d\bar{r}, \quad (79)$$

где Γ находится из решения задачи (23)—(27) для частиц конечного размера, а St и \bar{d} связаны соотношением (49).

На рис. 15 и 16 представлены зависимости коэффициента седиментации (79) от числа Стокса и безразмерного радиуса частиц.

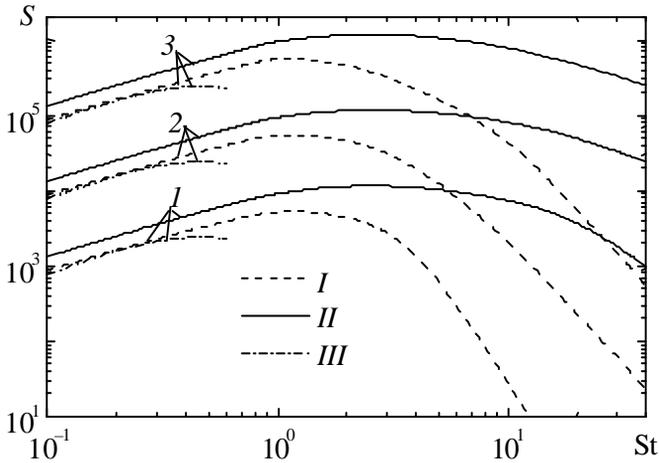


Рис. 15. Влияние числа Стокса на коэффициент седиментации инерционных частиц:

I, II — (79); III — (77); I — $Re_{\lambda} = 50$; II — $Re_{\lambda} = 100$;

$1, 2, 3$ — $\rho_p / \rho_f = 10^2, 10^3, 10^4$

Как видно, S возрастает с увеличением числа Рейнольдса Re_{λ} и отношения плотностей частиц и жидкости ρ_p / ρ_f . Максимум S соответствует значению числа St , близкому к единице, что объясняется максимальной кластеризацией частиц при совпадении их времени релаксации с временным колмогоровским масштабом турбулентности. С увеличением отношения плотностей ρ_p / ρ_f максимум в соответствии с (49) смещается в сторону меньших значений \bar{d} .

На рис. 16 показан также коэффициент седиментации при малых числах St , даваемый формулой (77). Видно, что соответствие аналитической за-

висимости (77) значениям, полученным численным интегрированием (79), имеет место только при малых числах Стокса.

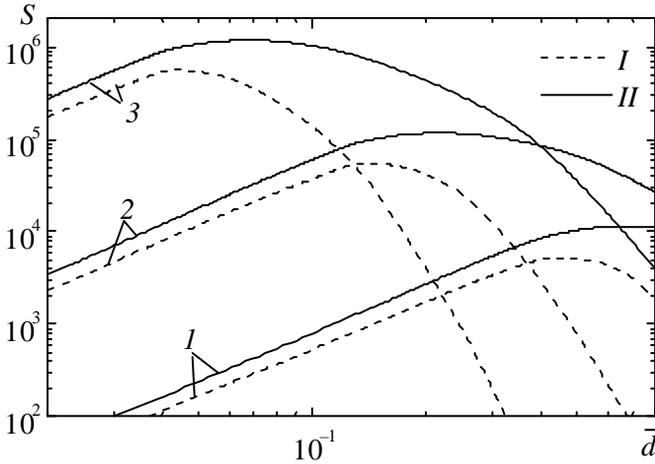


Рис. 16. Влияние диаметра частиц на коэффициент седиментации инерционных частиц:

$I - Re_\lambda = 50, II - Re_\lambda = 100$; 1, 2, 3 — $\rho_p / \rho_f = 10^2, 10^3, 10^4$

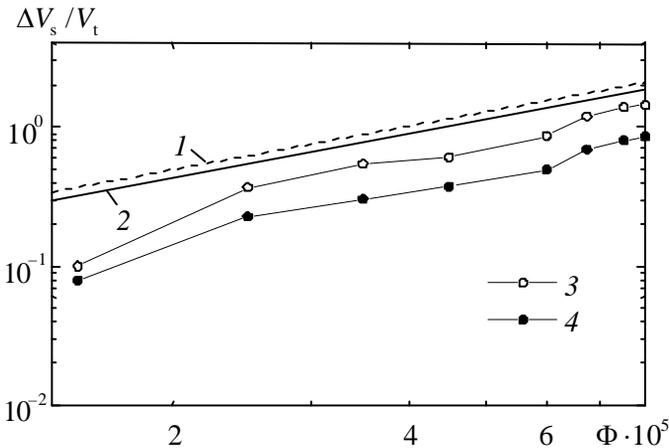


Рис. 17. Зависимость скорости седиментации кластеров от объемной концентрации частиц:

1, 2 — модель; 3, 4 — эксперимент [13]; 1, 3 — $St = 0,85$; 2, 4 — $St = 1,38$

На рис. 17 составляющая скорости седиментации частиц, обусловленная их кластеризацией, сравнивается с результатами экспериментов [13], полученными для оседания капель воды в воздушной турбулентной среде. Видно качественное согласие скорости седиментации кластеров, предсказываемой теоретической моделью, с экспериментальными данными; хотя теория и приводит к бóльшим значениям $\Delta V_s/V_t$ по сравнению с экспериментальными. Это расхождение может быть связано с неучетом влияния силы тяжести на РФР. Как отмечалось в [44; 55; 82], гравитационная седиментация может существенно влиять на РФР, что, в свою очередь, согласно (79) приводит к изменению скорости седиментации.

7. Влияние кластеризации частиц на рассеяние микроволнового излучения

Экспериментальные данные для малых кучевых облаков [83; 84] и двух-частотные радарные измерения для дымного пламени от большого пожара [85] показали существенное отличие от теоретических результатов, основанных на двух известных механизмах рассеяния излучения: рэлеевского рассеяния одиночными частицами и брегговского рассеяния на флуктуациях плотности воздуха. Согласно [86] это отличие может быть объяснено значительным вкладом когерентного рассеяния микроволнового излучения кластерами, формирующимися в результате взаимодействия частиц с турбулентностью. Для кучевых облаков когерентное рассеяние кластерами из капель воды может оказаться основным механизмом рассеяния, особенно в сантиметровом диапазоне спектра [86]. В этом разделе мы оценим эффект кластеризации частиц на когерентное рассеяние микроволнового излучения для условий, типичных для атмосферных облаков, содержащих мелкие капли воды.

Постановка задачи включает интерференцию электромагнитных волн, рассеянных произвольно расположенными частицами, и основана на так называемой гипотезе независимого рассеяния, согласно которой каждая частица рассеивает излучение независимо от остальных частиц.

Кроме того, предполагается, что выполняются следующие условия: $\pi d/\lambda \ll 1$ и $\pi d |n|/\lambda \ll 1$, где λ — длина волны излучения; n — комплексный показатель преломления. В этом случае, принимая, что точка наблюдения вынесена в зону Фраунгофера, т. е. находится достаточно далеко от рассеивающего объема, можно получить простое выражение для средней интенсивности рассеянного излучения

$$I(\theta) = I_0(\theta)(1 + K), \quad (80)$$

где I — интенсивность излучения, рассеянного под углом θ к направлению падающего излучения; I_0 — интенсивность излучения, рассеянного отдельными частицами в отсутствие интерференции, т. е. без учета коррелированности расположения частиц в пространстве (эффекта кластеризации); K — коэффициент увеличения интенсивности рассеяния за счет интерференции в результате кластеризации частиц. Величина K не зависит от радиационных характеристик частиц и определяется таким же соотношением, аналогичным существующему в теории рассеяния рентгеновских лучей жидкостью [87; 88]:

$$K(s) = \frac{4\pi N}{s} \int_0^{\infty} [\Gamma(r) - 1] \sin(sr) r dr, \quad s = \frac{4\pi}{\lambda} \sin\left(\frac{\theta}{2}\right), \quad (81)$$

где N — числовая концентрация частиц. Из (81) видно, что величина K может быть интерпретирована как синус-преобразование Фурье функции $4\pi N [\Gamma(r) - 1] r / s$. Применяя обратное синус-преобразование Фурье, получим

$$\Gamma(r) = 1 + \frac{1}{2\pi^2 N r} \int_0^{\infty} K(s) \sin(sr) s ds. \quad (82)$$

Соотношение (82) позволяет определить РФР, используя экспериментальные данные по рассеянию микроволнового излучения на частицах.

Далее оценим K для условий кластеризации водных капель в атмосферных облаках. Для этих условий безразмерный диаметр частиц \bar{d} не превышает 0,01, а число Стокса St меньше, чем 0,1 [89]. Поэтому, как и для оценки влияния кластеризации на скорость седиментации малоинерционных частиц в подразделе 6.2, будем использовать для определения РФР соотношения (36), (41), (47). После их подстановки в (81) получаем

$$K = \frac{4\pi \bar{N}}{\bar{s}} \int_0^{\bar{r}_{cl}} (C_{\Gamma} \bar{r}^{\chi} - 1) \sin(\bar{s} \bar{r}) \bar{r} d\bar{r}, \quad \bar{s} = s\eta, \quad \bar{N} = N\eta^3, \quad (83)$$

где радиус кластера \bar{r}_{cl} определяется выражением (75).

При малых значениях параметра \bar{s} выражение (83) удобно представить в виде сходящегося ряда

$$K = 4\pi \bar{N} |\chi| \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j \bar{s}^{-2j} C_{\Gamma}^{(2j+3)/|\chi|}}{(2j+1)!(2j+3)(2j+3-|\chi|)}, \quad (84)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция. При $St \ll 1$ из (84) следует

$$K = 24\pi\bar{N}St^2 \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j \bar{s}^{-2j} e^{4j+6}}{(2j+1)!(2j+3)^2},$$

где первый член дает главный вклад в учет кластеризации на рассеяние излучения

$$K = \frac{8\pi e^6}{3} \bar{N} St^2. \quad (85)$$

Из (85) следует, что при $St \ll 1$ коэффициент увеличения рассеяния в результате кластеризации изменяется прямо пропорционально квадрату числа Стокса, т. е. $K \propto St^2$. Величина K / \bar{N} , определенная по формулам (83) и (85), изображена на рис. 18.

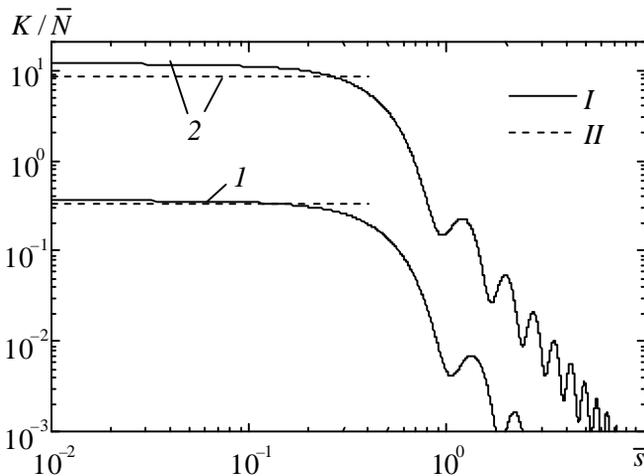


Рис. 18. Коэффициент увеличения рассеяния в результате кластеризации частиц: I — (83), II — (85); 1 — $St = 0,01$, 2 — $St = 0,05$

Видно, что формула (85) дает удовлетворительную оценку K при значениях $\bar{s} < 0,5$ и $St \leq 0,05$, которые соответствуют реальному диапазону изменения этих параметров для микроволнового зондирования кучевых облаков. Отметим, что для кучевых облаков имеем $\bar{N} \sim 1$, поскольку $N \sim 1 \text{ мм}^{-3}$ и $\eta \sim 1 \text{ мм}$. Поэтому приведенную величину K / \bar{N} можно

приближенно рассматривать как собственно коэффициент увеличения рассеяния K . Приведенная оценка показывает, что эффект кластеризации мелких капель воды в облачной атмосфере может существенно увеличивать рассеяние микроволнового излучения. В практическом отношении это означает, что регистрация рассеяния излучения в миллиметровом диапазоне может быть использована для получения экспериментальной информации о кластеризации капель воды в облаках.

8. Подсеточные напряжения частиц

В заключение используем двухточечную статистическую теорию для анализа поведения осредненных подсеточных напряжений частиц в зависимости от их инерционности и толщины фильтра. Подсеточные напряжения требуются для эйлерова континуального моделирования движения и дисперсии частиц в рамках метода крупных вихрей [90—94]. С этой целью привлечем соотношение между статистически осредненными подсеточными напряжениями и СФС второго порядка, полученное в [95] для турбулентной жидкости. Очевидно, что аналогичное соотношение имеет место и для частиц:

$$\langle \sigma_{ij}^r \rangle = \frac{1}{2} \iint G(\mathbf{x} - \mathbf{x}_1, \Delta) G(\mathbf{x} - \mathbf{x}_2, \Delta) S_{pij}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2, \quad (86)$$

где σ_{ij}^r — подсеточные напряжения частиц; G — ядро фильтра.

Следуя [95], проведем анализ для гауссова фильтра

$$G(\mathbf{z}, \Delta) = \prod_i G(z_i, \Delta), \quad G(z_i, \Delta) = \frac{1}{(2\pi)^{1/2} \Delta} \exp\left(-\frac{z_i^2}{2\Delta^2}\right), \quad (87)$$

где Δ — толщина фильтра.

Переходя в (86) к координатам

$$\mathbf{r} = \mathbf{x}_2 - \mathbf{x}_1, \quad \mathbf{s} = \frac{\mathbf{x}_1 + \mathbf{x}_2}{2},$$

интегрируя по \mathbf{s} и угловой координате \mathbf{r} , а также учитывая (87), получим выражение для осредненных подсеточных напряжений частиц в однородной изотропной турбулентности

$$\langle \sigma_{ij}^r \rangle = \frac{2\pi\delta_{ij}}{3} \int_0^\infty G(\mathbf{r}, \sqrt{2}\Delta) [S_{pi}(r) + 2S_{pim}(r)] r^2 dr. \quad (88)$$

Свертка (88) дает осредненную подсчетную кинетическую энергию частиц

$$\langle k_p^r \rangle = \frac{\langle \sigma_{ii}^r \rangle}{2} = \frac{1}{8\sqrt{\pi}\Delta^3} \int_0^\infty \exp\left(-\frac{r^2}{4\Delta^2}\right) [S_{p||}(r) + 2S_{p\perp}(r)] r^2 dr, \quad (89)$$

где используется явное выражение для гауссова фильтра (87).

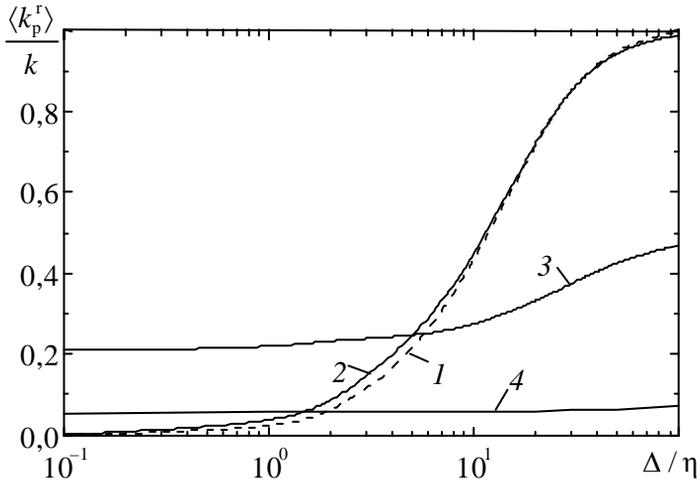


Рис. 19. Влияние толщины фильтра на осредненную подсчетную кинетическую энергию частиц, отнесенную к полной турбулентной энергии жидкости, при $Re_\lambda = 100$:
1 — $St = 0$, 2 — $St = 1$, 3 — $St = 10$, 4 — $St = 100$

На рис. 19 показано влияние толщины фильтра на подсчетную кинетическую энергию частиц, отнесенную к полной турбулентной энергии жидкости k . Расчеты проведены по формуле (89) для распределений продольной и поперечной СФС точечных частиц.

Из рис. 19 видно, что осредненная подсчетная энергия жидкости $\langle k_p^r \rangle$, соответствующая безынерционным частицам ($St = 0$), с увеличением толщины фильтра монотонно возрастает от нуля при $\Delta = 0$ и стремится к полной кинетической энергии k . Осредненная подсчетная энергия частиц также возрастает с увеличением Δ , однако с ростом числа Стокса зависимость $\langle k_p^r \rangle$ от Δ выполаживается, что связано с практически однородным распределением структурных функций при больших St . Асимпто-

тическое значение $\langle k_p^r \rangle / k$ при $\Delta \rightarrow \infty$ снижается с ростом St , что обусловлено слабым вовлечением высокоинерционных частиц в турбулентное движение жидкости.

На рис. 20 демонстрируется влияние толщины фильтра на подсеточную кинетическую энергию частиц, нормализованную на их полную кинетическую энергию k_p .

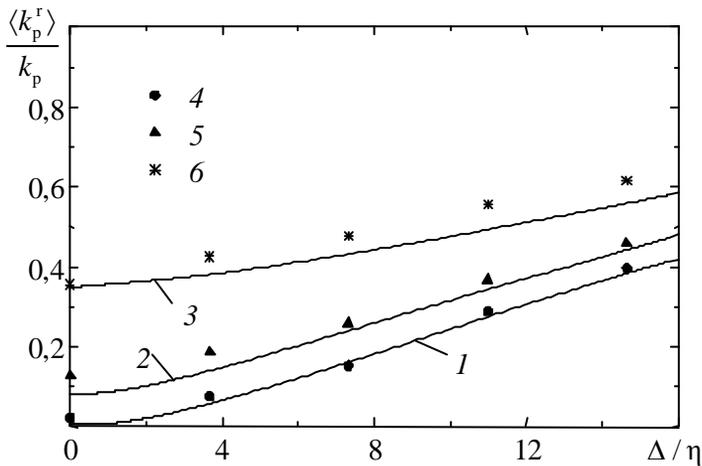


Рис. 20. Влияние толщины фильтра на осредненную подсеточную кинетическую энергию частиц, отнесенную к их полной турбулентной энергии, при $Re_\lambda = 20$:
 1—3 — модель; 4—6 — DNS [95]; 1, 4 — $St = 0,8$; 2, 5 — $St = 1,8$;
 3, 6 — $St = 4,1$

Теоретические результаты сравниваются с фильтрованными данными прямого численного моделирования для однородной изотропной затухающей турбулентности [94]. Видно монотонное возрастание $\langle k_p^r \rangle / k_p$ с увеличением Δ / η и St , а также хорошее соответствие результатов, предсказываемых теоретической моделью и полученных прямым численным моделированием.

9. Заключение

Целью данной статьи было представить теоретические статистические модели для статистики поля скорости, дисперсии и аккумуляирования инерционных тяжелых частиц в однородных турбулентных потоках. Эти модели основаны на кинетическом уравнении для двухточечной ФПВ распределения относительной скорости пары частиц. Кинетическое уравнение замкнуто в предположении, что турбулентное поле скорости жидкости описывается гауссовым случайным процессом с известными двухточечными корреляционными функциями. Справедливость представленных теоретических моделей устанавливается путем сопоставления с данными прямых расчетов и экспериментов для стационарной и затухающей турбулентности. В статье рассмотрен ряд приложений, в которых эффект кластеризации частиц может иметь важное значение. Главные результаты и выводы, полученные в работе, сводятся к следующему:

1. Представленные теоретические статистические модели воспроизводят все основные особенности статистики двухточечных моментов второго порядка поля скорости и аккумуляирования частиц в однородной изотропной турбулентности, найденные в прямых численных и экспериментальных исследованиях. Статистическая теория, основанная на кинетическом уравнении для двухточечной ФПВ, справедлива во всем диапазоне изменения инерционности частиц и адекватно предсказывает наибольший эффект аккумуляирования при совпадении времени релаксации частиц и колмогоровского временного масштаба турбулентности.
2. Эффект аккумуляирования является максимальным для точечных частиц и уменьшается с увеличением их размера. Для точечных частиц неограниченный рост РФР при стремлении расстояния между частицами к нулю (сингулярность) может быть принят в качестве критерия кластеризации. Сингулярность РФР точечных частиц имеет место только при значениях числа Стокса, меньших критического значения.
3. С увеличением размера частиц относительная скорость частиц возрастает, а РФР уменьшается. Однако влияние размера существенно только на малых расстояниях между малоинерционными частицами.
4. Модель турбулентных столкновений частиц описывает два механизма: относительное движение частиц, обусловленное турбулентностью, и эффект аккумуляирования частиц, приводящий к дополнительному увеличению скорости их столкновений. Эта модель способна описать обусловленное турбулентностью ядро столкновений во всем диапазоне изменения числа Стокса (от безынерционных до высокоинерционных частиц).
5. Эффект аккумуляирования может оказывать существенное воздействие на увеличение скорости гравитационной седиментации в однородной турбулент-

ности. В соответствии с экспериментальными данными предсказывается линейный рост скорости седиментации от концентрации частиц и ее максимальное значение, когда число Стокса приближенно равно единице.

6. Кластеризация частиц приводит к увеличению интенсивности рассеяния микроволнового излучения. РФР частиц может быть определена из решения обратной задачи о когерентном рэлеевском рассеянии.

7. Двухточечная статистика относительной скорости пары частиц правильно описывает влияние размера фильтра и инерционности частиц на подсчетные напряжения. Представленные теоретические модели могут быть полезны для разработки эйлерова двухжидкостного подхода к моделированию двухфазных турбулентных течений в рамках метода крупных вихрей.

В качестве дальнейшего развития двухточечной статистической теории предполагается ее обобщение на высокие концентрации частиц, а также на заряженные частицы (пылевую плазму) в турбулентных потоках. Кроме того, предполагается исследовать возможность образования упорядоченных жидкостно-подобных кластерных структур заряженных и незаряженных частиц в турбулентной среде.

Литература

1. *Maxey M. R.* The gravitational settling of aerosol particles in homogeneous turbulence and random flow fields // *J. Fluid Mech.* — 1987. — Vol. 174. — P. 441—465.
2. *Elperin T., Kleorin N., Rogachevskii I.* Self-excitation of fluctuations of inertial particle concentration in turbulent fluid flow // *Phys. Rev. Letters.* — 1996. — Vol. 66, № 77. — P. 5373—5376.
3. *Squires K. D., Eaton J. K.* Preferential concentration of particles by turbulence // *Phys. Fluids A.* — 1991. — Vol. 3, № 5. — P. 1169—1178.
4. *Wang L.-P., Maxey R. M.* Settling velocity and concentration distribution of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence // *J. Fluid Mech.* — 1993. — Vol. 256. — P. 27—68.
5. *Fessler J. R., Kulick J. D., Eaton J. K.* Preferential concentration of heavy particles in a turbulent channel flow // *Phys. Fluids.* — 1994. — Vol. 6, № 11. — P. 742—749.
6. *Sundaram S., Collins L. R.* Collision statistics in an isotropic particle-laden turbulent suspension. — Pt. 1. Direct numerical simulations // *J. Fluid Mech.* — 1997. — Vol. 335. — P. 75—109.
7. *Reade W. C., Collins L. R.* Effect of preferential concentration on turbulent collision rates // *Phys. Fluids.* — 2000. — Vol. 12, № 10. — P. 2530—2540.

8. Wang L.-P., Wexler A. S., Zhou Y. Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles // *J. Fluid Mech.* — 2000. — Vol. 415. — P. 117—153.
9. Balkovsky E., Falkovich G., Fouxon A. Intermittent distribution of inertial particles in turbulent flows // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 86, № 13. — P. 2790—2793.
10. Hogan R. C., Cuzzi J. N. Stokes and Reynolds number dependence of preferential particle concentration in simulated three-dimensional turbulence // *Phys. Fluids.* — 2001. — Vol. 13, № 10. — P. 2938—2945.
11. Kostinski A. B., Shaw R. A. Scale-dependent droplet clustering in turbulent clouds // *J. Fluid Mech.* — 2001. — Vol. 434. — P. 389—398.
12. Rouson D. W. I., Eaton J. K. On the preferential concentration of solid particles in turbulent channel flow // *J. Fluid Mech.* — 2001. — Vol. 428. — P. 149—169.
13. Aliseda A., Cartellier A., Hainaux F., Lasheras J. C. J. Effect of preferential concentration on the settling velocity of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence // *Fluid Mech.* — 2002. — Vol. 468. — P. 77—105.
14. Elperin T., Kleeorin N., L'vov V. S. et al. Clustering instability of the spatial distribution of inertial particles in turbulent flows // *Phys. Rev. E.* — 2002. — Vol. 66, № 036302.
15. Marchioli C., Soldati A. Mechanisms for particle transport and segregation in a turbulent boundary layer // *J. Fluid Mech.* — 2002. — Vol. 468. — P. 283—315.
16. Sigurgeirsson H., Stuart A. M. A model for preferential concentration // *Phys. Fluids.* — 2002. — Vol. 14, № 12. — P. 4352—4361.
17. Simonin O., Février P., Laviéville J. On the spatial distribution of heavy particle velocities in turbulent flow: From continuous field to particulate chaos // *J. Turbulence.* — 2002. — Vol. 3, № 040.
18. Bec J. Fractal clustering of inertial particles in random flows // *Phys. Fluids.* — 2003. — Vol. 15, № 11. — P. L81—84.
19. Boffetta G., De Lillo F., Gamba A. Large scale inhomogeneity of inertial particles in turbulent flows // *Phys. Fluids.* — 2004. — Vol. 16, № 4. — P. L20—L23.
20. Collins L. R., Keswani A. Reynolds number scaling of particle clustering in turbulent aerosols // *New J. Phys.* — 2004. — Vol. 6, № 119.
21. Falkovich G., Pumir A. Intermittent distribution of heavy particles in turbulent flow // *Phys. Fluids.* — 2004. — Vol. 16, № 7. — P. L47—50.
22. Bec J. Multifractal concentrations of inertial particles in smooth random flows // *J. Fluid Mech.* — 2005. — Vol. 528. — P. 255—277.
23. Duncan K., Mehlig B., Östlund S., Wilkinson M. Clustering by mixing flows // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 95, № 240602.

24. *Février P., Simonin O., Squires K. D.* Partitioning of particle velocities in gas-solid turbulent flows into a continuous field and a spatially-uncorrelated random distribution: theoretical formalism and numerical study // *J. Fluid Mech.* — 2005. — Vol. 533. — P. 1—46.
25. *Wood A. M., Hwang W., Eaton J. K.* Preferential concentration of particles in homogeneous and isotropic turbulence // *Int. J. Multiphase Flow.* — 2005. — Vol. 31. — P. 1220—1230.
26. *Chen L., Goto S., Vassilicos J. C.* Turbulent clustering of stagnation points and inertial particles // *J. Fluid Mech.* — 2006. — Vol. 553. — P. 143—154.
27. *Kerstein A. R., Krueger S. K.* Clustering of randomly advected low-inertia particles: A solvable model // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Vol. 73, № 025302.
28. *Bec J., Cencini M., Hillerbrand R.* Clustering of heavy particles in random self-similar flow // *Phys. Rev. E.* — 2007. — Vol. 75, № 025301(R).
29. *Elperin T., Kleorin N., Liberman M. A. et al.* Clustering of aerosols in atmospheric turbulent flow // *Environ. Fluid Mech.* — 2007. — Vol. 7. — P. 173—193.
30. *Yoshimoto H., Goto S.* Self-similar clustering of inertial particles in homogeneous turbulence // *J. Fluid Mech.* — 2007. — Vol. 577. — P. 275—286.
31. *Calzavarini E., Kerscher M., Lonse D., Toschi F.* Dimensionality and morphology of particle and bubble clusters in turbulent flow // *J. Fluid Mech.* — 2008. — Vol. 607. — P. 13—24.
32. *Salazar J. P. L. C., de Jong J., Cao L. et al.* Experimental and numerical investigation of inertial particle clustering in isotropic turbulence // *J. Fluid Mech.* — 2008. — Vol. 600. — P. 245—256.
33. *Saw E. W., Shaw R. A., Ayyalasomayajula S. et al.* Inertial clustering of particles in high-Reynolds-number turbulence // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 100, № 214501.
34. *Caporaloni M., Tampieri F., Trombetti F., Vittori O.* Transfer of particles in nonisotropic air turbulence // *J. Atmos. Sci.* — 1975. — Vol. 32. — P. 565—568.
35. *Reeks M. W.* The transport of discrete particles in inhomogeneous turbulence // *J. Aerosol Sci.* — 1983. — Vol. 14, № 6. — P. 729—739.
36. *Zaichik L. I., Alipchenkov V. M.* Pair dispersion and preferential concentration of particles in isotropic turbulence // *Phys. Fluids.* — 2003. — Vol. 15, № 6. — P. 1776—1787.
37. *Chun J., Koch D. L., Rani S. L. et al.* Clustering of aerosol particles in isotropic turbulence // *J. Fluid Mech.* — 2005. — Vol. 536. — P. 219—251.

38. *Bosse T., Kleiser L., Meiburg E.* Small particles in homogeneous turbulence: Settling velocity enhancement by two-way coupling // *Phys. Fluids*. — 2006. — Vol. 18, № 027102.
39. *Wang L.-P., Ayala O., Grabovski W.* Effects of aerodynamic interactions on the motion of heavy particles in bidisperse suspension // *J. Turbulence*. — 2007. — Vol. 8, № 25.
40. *Zhou Y., Wexler A. S., Wang L.-P. J.* Modelling turbulent collision of bidisperse inertial particles // *Fluid Mech.* — 2001. — Vol. 433. — P. 77—104.
41. *Zaichik L. I., Simonin O., Alipchenkov V. M.* Two statistical models for predicting collision rates of inertial particles in homogeneous isotropic turbulence // *Phys. Fluids*. — 2003. — Vol. 15, № 10. — P. 2995—3005.
42. *Bec J., Celani A., Cencini M., Musacchio S.* Clustering and collisions of heavy particles in random smooth flows // *Phys. Fluids*. — 2005. — Vol. 17, № 073301.
43. *Chun J., Koch D. L.* Coagulation of monodisperse aerosol particles by isotropic turbulence // *Phys. Fluids*. — 2005. — Vol. 17, № 027102.
44. *Franklin C. N., Vaillancourt P. A., Yau M. K., Bartello P.* Collision rates of cloud droplets in turbulent flow // *J. Atmos. Sci.* — 2005. — Vol. 62. — P. 2451—2466.
45. *Zaichik L. I., Simonin O., Alipchenkov V. M.* Collision rates of bidisperse inertial particles in isotropic turbulence // *Phys. Fluids*. — 2006. — Vol. 18, № 035110.
46. *Franklin C. N., Vaillancourt P. A., Yau M. K.* Statistics and parameterizations of the effect of turbulence on the geometric collision kernel of cloud droplets // *J. Atmos. Sci.* — 2007. — Vol. 64. — P. 938—954.
47. *Khain A., Pinsky M., Elperin T. et al.* Critical comments on results of investigations of drop collisions in turbulent clouds // *Atmos. Res.* — 2007. — Vol. 86. — P. 1—20.
48. *Ayala O., Rosa B., Wang L.-P.* Effects of turbulence on the geometric collision rate of sedimenting droplets. Pt. 2: Theory and Parameterization // *New J. Phys.* — 2008. — Vol. 10, № 075016.
49. *Pinsky M. B., Khain A. P.* Turbulence effects on droplet growth and size distribution in clouds: A review // *J. Aerosol Sci.* — 1997. — Vol. 28, № 7. — P. 1177—1214.
50. *Falkovich G., Fouxon A., Stepanov G.* Acceleration of rain initiation by cloud turbulence // *Nature*. — 2002. — Vol. 419. — P. 151—154.
51. *Shaw R. A., Kostinski A. B., Lanterman D. D.* Super-exponential extinction of radiation in a negatively correlated random medium // *J. Quant. Spectr. and Radiat. Transfer*. — 2002. — Vol. 75. — P. 13—20.
52. *Wilkinson M., Mehlig B.* Caustics in turbulent aerosols // *Europhys. Lett.* — 2005. — Vol. 71, № 2. — P. 186—192.

53. *Wilkinson M., Mehlig B., Bezuglyy V.* Caustic activation of rain showers // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 97, № 048501.
54. *Mehlig B., Uski V., Wilkinson M.* Colliding particles in highly turbulent flows // *Phys. Fluids.* — 2007. — Vol. 19, № 098107.
55. *Falkovich G., Pumir A.* Sling effect in collisions of water droplets in turbulent clouds // *J. Atmos. Sci.* — 2007. — Vol. 64. — P. 4497—4505.
56. *Zaichik L. I., Alipchenkov V. M.* Refinement of the probability density function model for preferential concentration of aerosol particles in isotropic turbulence // *Phys. Fluids.* — 2007. — Vol. 19, № 113308.
57. *Монин А. С., Яглом А. М.* Статистическая гидромеханика. Ч. 2. — М.: Наука, 1967.
58. *Frisch U.* Turbulence. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 1995.
59. *Pope S. B.* Turbulent Flows. — Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2000.
60. *Lundgren T. S.* Kolmogorov turbulence by matched asymptotic expansions // *Phys. Fluids.* — 2003. — Vol. 15, № 4. — P. 1074—1081.
61. *Simonin O., Zaichik L. I., Février P., Alipchenkov V. M.* Connection between two statistical approaches for the modeling of particle velocity and concentration distributions in turbulent flow: The mesoscopic Eulerian formalism and the two-point PDF method // *Phys. Fluids.* — 2006. — Vol. 18, № 125107.
62. *Verzicco R., Camussi R.* Structure function exponents and probability density function of the velocity difference in turbulence // *Phys. Fluids.* — 2002. — Vol. 14, № 2. — P. 906—909.
63. *Wang L.-P., Wexler A. S., Zhou Y.* Statistical mechanical descriptions of turbulent coagulation // *Phys. Fluids.* — 1998. — Vol. 10, № 10. — P. 2647—2651.
64. *Sawford B. L.* Reynolds number effects in Lagrangian stochastic models of turbulent dispersion // *Phys. Fluids A.* — 1991. — Vol. 3. — P. 1577—1586.
65. *Girimaji S. S., Pope S. B.* A diffusion model for velocity gradients in turbulence // *Phys. Fluids A.* — 1990. — Vol. 2, № 2. — P. 242—256.
66. *Brunk B. K., Koch D. L., Lion L. W.* Hydrodynamic pair diffusion in isotropic random velocity fields with application to turbulent coagulation // *Phys. Fluids.* — 1997. — Vol. 9, № 9. — P. 2670—2691.
67. *Borgas M. S., Yeung P. K.* Relative dispersion in isotropic turbulence. — Pt. 2.: A new stochastic model with Reynolds-number dependence // *J. Fluid Mech.* — 2004. — Vol. 503. — P. 125—160.
68. *Derevyanko S., Falkovich G., Turitsyn S.* Evolution of non-uniformly seeded warm clouds in idealized turbulent conditions // *New J. Phys.* — 2008. — Vol. 10, № 075019.

69. *Fede P., Simonin O.* Numerical study of the subgrid fluid turbulence effects on the statistics of heavy colliding particles // *Phys. Fluids.* — 2006. — Vol. 18, № 045103.
70. *Kaufmann A., Moreau M., Simonin O., Helie J.* Comparison between Lagrangian and mesoscopic Eulerian modelling approaches for inertial particles suspended in decaying isotropic turbulence // *J. Comput. Phys.* — 2008. — Vol. 227. — P. 6448—6472.
71. *Saffman P. G., Turner J. S.* On the collision of drops in turbulent clouds // *J. Fluid Mech.* — 1956. — Vol. 1, № 1. — P. 16—30.
72. *Zhou Y., Wexler A. S., Wang L.-P.* On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. II. Finite inertia case // *Phys. Fluids.* — 1998. — Vol. 10, № 5. — P. 1206—1216.
73. *Abrahamson J.* Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid // *Chem. Eng. Sci.* — 1975. — Vol. 30, № 11. — P. 1371—1379.
74. *Yang C. Y., Lei U.* The role of turbulent scales in the settling velocity of heavy particles in homogeneous isotropic turbulence // *J. Fluid Mech.* — 1998. — Vol. 371. — P. 179—205.
75. *Yang T. S., Shy S. S.* The settling velocity of heavy particles in an aqueous near-isotropic turbulence // *Phys. Fluids.* — 2003. — Vol. 15, № 4. — P. 868—880.
76. *Yang T. S., Shy S. S.* Two-way interaction between solid particles and homogeneous air turbulence: particle settling rate and turbulence modification measurements // *J. Fluid Mech.* — 2005. — Vol. 526. — P. 171—216.
77. *Batchelor G. K.* Sedimentation in a dilute polydisperse system of interacting spheres. Pt. 1.: General theory // *J. Fluid Mech.* — 1982. — Vol. 119. — P. 379—408.
78. *Jeffrey D. J., Onishi Y.* Calculation of the resistance and mobility functions for two unequal rigid spheres in low-Reynolds-number flow // *J. Fluid Mech.* — 1984. — Vol. 139. — P. 261—290.
79. *Batchelor G. K.* Sedimentation in a dilute dispersion of spheres // *J. Fluid Mech.* — 1972. — Vol. 52. — P. 245—268.
80. *Batchelor G. K., Green J. T.* The determination of the bulk stress in a suspension of spherical particles to order c^2 // *J. Fluid Mech.* — 1972. — Vol. 56. — P. 401—427.
81. *Batchelor G. K., Green J. T.* The hydrodynamic interaction of two small freely-moving spheres in a linear flow field // *J. Fluid Mech.* — 1972. — Vol. 56. — P. 375—400.
82. *Wang L.-P., Ayala O., Xue Y., Grabowski W. W.* Comments on “Droplets to drops by turbulent coagulation” // *J. Atmos. Sci.* — 2006. — Vol. 63. — P. 2397—2401.

83. *Baker B. A., Brenguier J.-L., Cooper W.* Unknown source of reflectivity from small cumulus clouds // Proc. Amer. Meteor. Soc. Conf. Cloud Phys. — [S. l.], 1998. — P. 148—151.
84. *Knight C. A., Miller L. J.* Early radar echoes from small, warm cumulus: Bragg and Hydrometeor scattering // J. Atmos. Sci. — 1998. — Vol. 55, № 18. — P. 2974—2992.
85. *Rogers R. R., Brown W. O. J.* Radar observations of a major industrial fire // Bul. Am. Meteor. Soc. — 1997. — Vol. 78, № 5. — P. 803—814.
86. *Erkelens J. S., Venema V. K. C., Russchenberg H. W. J., Ligthart L. P.* Coherent scattering of microwaves by particles: Evidence from clouds and smoke // J. Atmos. Sci. — 2001. — Vol. 58, № 9. — P. 1091—1102.
87. *Фишер И. З.* Статистическая теория жидкостей. — М.: Физматлит, 1961.
88. *Hirschfelder J. O., Curtiss C. F., Bird R. R.* The Molecular Theory of Gases and Liquids. — New York: Wiley, 1954.
89. *Shaw R. A.* Particle-turbulence interactions in atmospheric clouds // Annu. Rev. Fluid. Mech. — 2003. — Vol. 35. — P. 183—227.
90. *Pandya R. V. R., Mashayek F.* Two-fluid large-eddy simulation approach for particle-laden turbulent flows // Int. J. Heat Mass Transfer. — 2002. — Vol. 45. — P. 4753—4759.
91. *Moreau M., Bedat B., Simonin O.* From Euler-Lagrange to Euler-Euler large-eddy simulation approaches for gas-particle turbulent flows // ASME Fluids Eng. Summer Conference. 2005. — [S. l.], 2005. — (FEDS2005-77306).
92. *Shotorban B., Balachandar S.* A Eulerian model for large-eddy simulation of concentration of particles with small Stokes numbers // Phys. Fluids. — 2007. — Vol. 19, № 118107.
93. *Boileau M., Pascaud S., Riber E.* et al. Investigation of two-fluid methods for large eddy simulation of spray combustion in gas turbines // Flow Turbulence Combust. — 2008. — Vol. 80. — P. 291—321.
94. *Moreau M., Simonin O., Bedat B.* Development of gas-particle Euler-Euler LES approach: a priori analysis of particle sub-grid models in homogeneous isotropic turbulence // Flow, Turbulence and Combustion. — 2010. — Vol. 84. — P. 295—324.
95. *Germano M.* A direct relation between the filtered subgrid stress and the second order structure function // Phys. Fluids. — 2007. — Vol. 19, № 038102.

Теоретические модели образования, эволюции и осаждения аэрозолей в элементах реакторной установки АЭС

А. А. Сорокин, Л. И. Зайчик, В. Ф. Стрижов, С. В. Цаун

1. Введение

Загрязнение местности радиоактивными продуктами деления (ПД) является одним из главных отрицательных последствий тяжелых аварий на АЭС. Аварии с выходом ПД на атомных станциях могут быть обусловлены отказами оборудования, приводящими к частичному или полному осушению активной зоны (АЗ) реактора. Это, в свою очередь, может вызвать перегрев активной зоны, достаточный для того, чтобы по крайней мере у нескольких топливных стержней разрушилась оболочка [1—3]. При съеме тепла, неадекватном тепловыделению, твэлы (тепловыделяющие элементы) разогреваются до высокой температуры, и может начаться плавление АЗ. Радиационные последствия таких аварий в значительной степени определяются фазовым состоянием и поведением ПД в первом контуре (ПК) и помещениях защитной оболочки реактора. При развитии такой аварии большинство конденсирующихся ПД выходит из расплава топлива и конструкционных материалов АЗ в результате испарения вследствие развития локально высоких температур. Продукты деления в облученном топливе обладают различными термодинамическими свойствами. При смешении паров ПД с более холодным газом-теплоносителем — парами воды (потенциально это может быть также смесь паров воды, водорода и воздуха) — формируются условия для их конденсации на поверхностях и частицах конструкционных материалов. Также возможна интенсивная гомогенная и иониндуцированная нуклеация паров ПД. В результате образуется множество мельчайших аэрозольных частиц. При этом транспортные свойства мелких частиц, а также их реакционная способность могут существенно отличаться от свойств более крупных частиц.

Поведение ПД после их выхода из каналов АЗ существенно зависит от их фазового состояния. Распределение по размеру и плотности частиц аэрозолей ПД определяет динамику их переноса и осаждения на поверхностях в первом контуре. Кроме того, некоторые из ПД могут существовать в нескольких химических состояниях с существенно различающимися физическими свойствами. Пример — летучие пары цезия, полuletучие пары мо-

либдена и нелетучий окисел Cs_2MoO_4 . Наличие нерадиоактивных продуктов также может влиять на тип соединения и фазовое состояние ПД. Так, пары металлов управляющего стержня (например, кадмия, индия, серебра) при их выходе в ПК кардинальным образом влияют на спецификацию и фазовое состояние соединений йода [4; 5]. В этом случае поведение ПД в первом контуре необходимо рассматривать, учитывая неравновесную кинетику как газофазной химии, так и фазовых переходов ПД. Ионы в газовой фазе, а также самозарядка частиц радиоактивного аэрозоля — еще один источник влияния на процессы образования и эволюции дисперсных частиц в элементах реакторной установки (РУ) [6; 7]. Потенциально нуклеация паров ПД может начаться уже в газовом объеме твэла и на выходе из активной зоны реактора. Для количественной оценки этого процесса необходимо прежде всего определить, какие соединения и в каких количествах образуются в паровой фазе, а также какие из них с точки зрения термодинамики могут конденсироваться. Для описания выхода ПД из топлива в системных кодах предложены соответствующие модели различного уровня сложности и детализации учитываемых процессов, например, полуэмпирическая модель ELSA в системном коде ASTEC (Франция — Германия) [8] и более детальная кинетическая модель MFPR в системном коде СОКРАТ (ИБРАЭ РАН) [9; 10].

1.1. Общая схема рассматриваемых процессов

При переносе ПД с газовыми потоками в каналах ПК они могут находиться в следующих физических состояниях:

- парогазовая смесь;
- взвешенные частицы аэрозолей;
- отложения на поверхностях.

Соответственно при моделировании эволюции ПД необходимо учитывать как процессы, происходящие внутри каждого состояния (например, газофазную химию или коагуляцию частиц), так и переходы ПД между состояниями (например, конденсацию различных паров на частицах или сорбцию части газовых компонентов на поверхности). В качестве отдельного физического состояния целесообразно рассматривать также фазу ионизированных атомов и молекул и заряженных частиц аэрозолей. Качественная схема возможных физико-химических процессов в смеси ПД и газотеплоносителя при их переносе в ПК показана на рис. 1. В соответствии с этой схемой конвективный перенос аэрозолей осуществляется со скоростью газовой фазы, моделирование которой производится вне аэрозольного модуля (например, в модуле РАТЕГ в российском интегральном коде СОКРАТ). При этом частицы могут претерпевать ряд физико-химических превращений, определяющих изменение их размера и состава, например,

в результате многокомпонентной конденсации различных паров ПД или вследствие процессов коагуляции и осаждения.

В большинстве аэрозольных кодов, используемых при расчетах запроектных аварий, для моделирования эволюции частиц аэрозолей в ПК используется консервативный подход, т. е. задаются параметры начальной функции распределения частиц по размеру и плотность вещества частиц. Предполагается, что плотность вещества частиц в дальнейшем не меняется. Прямой учет нуклеации при переносе ПД в ПК (т. е. дополнительное образование частиц аэрозолей) рассматривается, например, в модуле SOPHAEROS интегрального кода ASTEC [4; 5], при этом она моделируется в приближении классической теории [11; 12]. Однако плотность и состав частиц и здесь также полагаются постоянными.

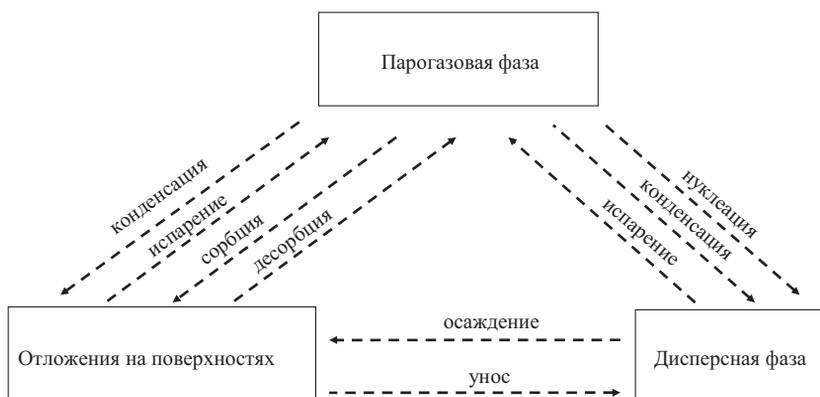


Рис. 1. Общая качественная схема физико-химических процессов различных соединений продуктов деления в первом контуре реактора

Осаждение паров и частиц аэрозоля на поверхность зависит от наличия и фазового состояния отложения на поверхности — жидкой пленки (например, осевших капель ПД в горячих каналах ПК или водного конденсата в холодных каналах парогенератора), твердой металлической поверхности или пористого отложения. Существенным является и тип осевших частиц аэрозоля — капли (т. е. образование жидкой пленки, а также потенциальная возможность обратного испарения паров с поверхности и небольшая вероятность отлипания частиц), твердые частицы (т. е. образование пористого отложения и возможность ресуспензии осевших частиц). Как показали результаты экспериментальной программы PHEBUS-FP, важно также химическое взаимодействие паров воды с отложениями, способное

приводить к образованию летучих компонентов ПД непосредственно в каналах ПК [4; 5; 13; 14].

Гидродинамика течения и физико-химические процессы в реакторе чрезвычайно сложны. Поэтому проведение полномасштабного расчета динамики развития аварии возможно лишь при существенном упрощении гидродинамики течения и кинетики поведения ПД в АЗ после их выхода из топлива и смешения с парами теплоносителя и далее в элементах ПК. Для этого при моделировании обычно применяется метод контрольного объема. В соответствии с ним все элементы ПК реактора разбиваются на ячейки фиксированного объема, в каждой из которых предполагается однородное распределение термодинамических параметров, а также мгновенное смешение поступающих в ячейку ПД и аэрозоля с несущим газом. Параметры источника ПД в данную расчетную ячейку (т. е. вид химического соединения и количество продукта, вышедшего в ячейку за единицу времени), а также температура, давление и скорость протока газа через ячейку рассчитываются в соответствующих модулях интегрального кода.

При моделировании кинетических процессов рассматривается только временная зависимость осредненных по объему ячейки концентраций компонентов газовой и дисперсной фаз. Следует отметить, что во всех существующих интегральных кодах химия газовой фазы ПД в ПК рассматривается только в равновесном приближении. Однако, как показали результаты экспериментальных исследований, учет неравновесной химической кинетики ПД при их переносе в ПК очень важен для оценки источника их эмиссии в помещения защитной оболочки [4]. В США, Франции и Германии начата разработка соответствующих моделей химических процессов и вычислительных модулей с последующим включением в интегральные коды ASTEC и MELCOR [14; 15].

1.2. Нодализационная схема реакторной установки и метод расчета по ячейкам

Схема расчетных ячеек для моделирования поведения ПД в газе теплоносителя в ПК реактора определена нодализацией соответствующих элементов реактора для решения теплогидравлической задачи (например, модуль RATEG в коде SOCRAT). Нодализация элементов реакторной установки учитывает ее существенную пространственную и тепловую неоднородность. С другой стороны, время проведения расчета непосредственно зависит от степени детализации элементов реактора. В качестве примера на рис. 2 и 3 показана детальная схема нодализации ячеек и проточных каналов в АЗ и верхней камеры смешения (ВКС) реактора ВВЭР-1000, принятая в российском коде СОКРАТ [16].

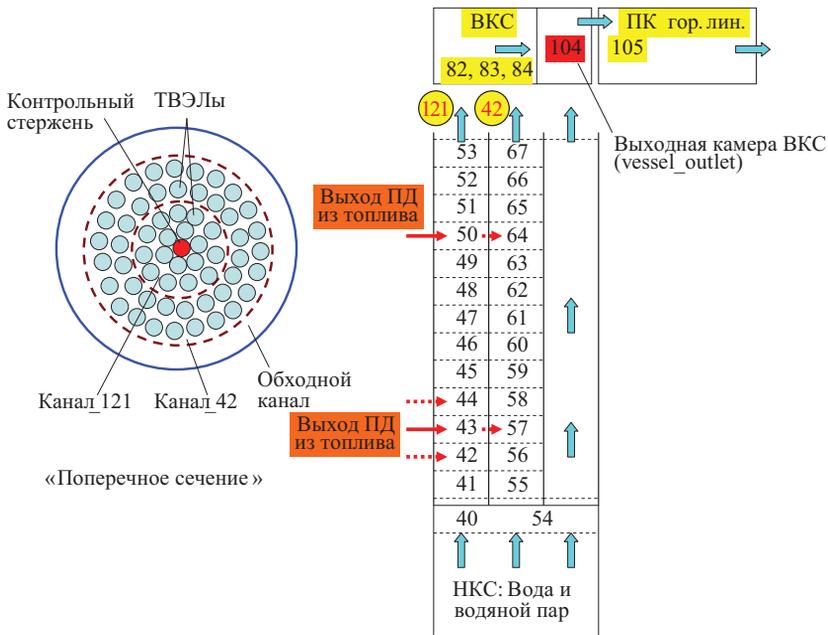


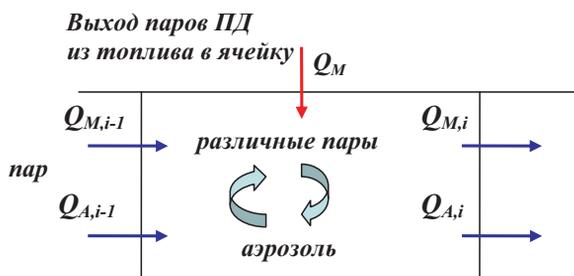
Рис. 3. Схема нодализации ячеек проточных каналов теплоносителя в АЗ и части ВКС. Например, на рис. 2 ячейки 82, 83 и 84 соответствуют обозначениям VKS-L, VKS-L-M и VKS-M, ячейка 104 соответствует камере vessel_outlet, а ячейка 105 соответствует первой расчетной ячейке горячей линии (hot_line) первого контура

Выход ПД моделируется в два канала в радиальном направлении (121 — центральный и 42 — периферийный) и 13 ячеек в аксиальном направлении для каждого канала. Ячейки 52 и 53 соответствуют области «головка твэла», также как ячейки 66 и 67. Ячейки 40 и 54 соответствуют области нижней камеры смешения (НКС). Также показаны ячейки ВКС — 82—84 и 104 (выходная камера — vessel_outlet на рис. 2).

Продукты деления могут претерпевать значительные физико-химические превращения в каналах активной зоны до момента попадания в выходную камеру (ячейка 104 на рис. 3) и далее в горячую ветку ПК (ячейка 105), а также взаимодействовать с различными поверхностями в верхней части реактора, как было показано в [5]. Поэтому целесообразно включить модель аэрозольной и газофазной кинетики ПД в элементах активной зоны (например, нуклеации частиц аэрозолей), верхней камеры смешения (ВКС) (например, осаждение аэрозолей) и верхней части реактора (например,

адсорбция ПД на поверхность) в имеющиеся модули интегрального кода либо разработать отдельный дополнительный модуль.

На рис. 4 представлена качественная схема процессов в отдельной ячейке и ее включения в общую нодализационную схему. Для каждой ячейки и для каждого текущего (глобального) расчетного шага по времени Δt интегрального кода вычисляются гидродинамические параметры среды, а именно состав газа теплоносителя (например, водяной пар, водород, гелий, воздух), скорость потока (одномерного) несущей среды через ячейку $V_g(t)$ и масса ΔM_k для каждого типа ПД, вышедшего в k -ю ячейку на данном глобальном временном шаге. Это позволяет определить два важных параметра, определяющих динамику поведения ПД в данной ячейке на данном временном шаге: характерное время пребывания газовой смеси в ячейке $\tau = L/V_g$, где L — характерная длина ячейки, и среднюю интенсивность эмиссии данного типа ПД в k -ю ячейку $Q_k = \Delta M_k / \Delta t$.



Параметры: T — температура, v — скорость потока газа через ячейку, P_v — парциальное давление пара, τ — характерное время пребывания газа в ячейке

Рис. 4. Качественная схема физических процессов в отдельной ячейке. Показаны источник эмиссии паров ПД из топлива, источники притока и уноса паров из ячейки в результате конвективного переноса ПД с газом несущей среды, а также кинетические процессы фазовых переходов «пар — аэрозоль»

Вычисление Δt для каждой ячейки позволяет определить коэффициенты переноса ПД между ячейками и тем самым моделировать в целом конвективный перенос и поведение ПД в ПК реактора на временном интервале $(t, t + \Delta t)$, т. е.

$$\frac{dM_k}{dt} = Q_k + \frac{M_{k-1}}{\tau_{k-1}} - \frac{M_k}{\tau_k} + F_k(t). \quad (1.1)$$

Здесь $k = 1, 2, \dots, N$, где N — общее число рассматриваемых ячеек. Функция F_k символически отражает влияние всех возможных в k -й ячейке физико-химических процессов (т. е. химических реакций, фазовых переходов и взаимодействия ПД с поверхностями). Уравнения (1.1) соответствуют эволюции одного M -нуклида по цепочке N ячеек. В реальном расчете количество уравнений увеличивалось бы пропорционально количеству N_n рассматриваемых нуклидов в различных состояниях, т. е. общее число уравнений было бы порядка $N_n N$. Система уравнений (1.1) самосогласованно описывает взаимодействие N ячеек на интервале $(t, t + \Delta t)$ при постоянных (по определению) Q_k (выход ПД из топлива в теплоноситель) и τ_k . При этом общее количество M -нуклида G_k , перешедшего за интервал Δt из k -й в $(k + 1)$ -ю ячейку, определяется по формуле

$$G_k = \frac{1}{\tau_k} \int_t^{t+\Delta t} M_k(t) dt = \overline{M}_k \frac{\Delta t}{\tau_k}. \quad (1.2)$$

Вследствие организации структуры кода СОКРАТ (в данном случае задание Δt в гидравлическом модуле РАТЕГ) изменение $M_k(t)$ на интервале Δt может быть очень существенным, так как характерные времена процессов F_k , обозначаемые символически как Δt (т. е. время нуклеации или коагуляции), скорее всего много меньше Δt . Вследствие этого $\overline{M}_k \neq M_k(t + \Delta t)$. Это означает, что моделирование переноса реагирующих ПД по последовательности N взаимосвязанных ячеек с помощью более простых и «расщепленных по ячейкам» систем уравнений (т. е. решение в одной ячейке для глобального шага Δt с последующей передачей полученных результатов посредством модуля РАТЕГ для расчета следующей ячейки), а именно таких, как, например,

$$\frac{dM_k}{dt} = Q_k + \frac{\overline{M}_{k-1}}{\tau_{k-1}} - \frac{M_k}{\tau_k} + F_k(t) \quad (1.3)$$

или

$$\frac{dM_k}{dt} = Q_k + \frac{M_{k-1}(t + \Delta t)}{\tau_{k-1}} - \frac{M_k}{\tau_k} + F_k(t), \quad (1.4)$$

может привести к существенным погрешностям в распределении M -нуклида по ячейкам. Эквивалентность систем (1.3) и (1.4) системе (1.1) достигается только при условии

$$\Delta t \text{ (расчет теплогидравлики)} \ll \Delta t \text{ (кинематический масштаб)}, \quad (1.5)$$

что диаметрально противоположно ситуации во всех интегральных кодах. Эквивалентность (1.3) или (1.4) и (1.1) также достигается, когда решение находится с шагом, меньшим Δt , и постоянно пересчитывается по всей цепочке N ячеек. Однако в этом случае существенно возрастает объем обмениваемой информации между гидравлическим и аэрозольным модулями, что очевидным образом увеличивает время расчета. Альтернативным системе (1.1) является переход к лагранжеву описанию переноса ПД, т. е. в локальном объеме несущей среды вдоль выделенной траектории его движения. В этом случае уравнение для эволюции M -нуклида принимает вид (в тех же обозначениях, что и в (1.1))

$$V_g(x) \frac{dM}{dx} = Q(x) + F(M, x), \quad (1.6)$$
$$x \in \left[L_0, L_0 + \sum_{k=1}^N L_k \right],$$

где переменная x — «продольная» координата по длине ячеек, а длина L символически соответствует началу первой рассматриваемой ячейки. Зависимости $V_g(x)$, $Q_g(x)$ и $F_g(x)$ отражают изменение по ячейкам гидравлических параметров несущей среды и скорости выхода ПД из топлива в теплоноситель на данном глобальном шаге по времени интегрального кода.

Зависимость $F(M)$ отражает нелинейный характер радиационно-химической кинетики нуклидов. В общем случае решается нелинейная система N_n уравнений. Фактически система (1.6) соответствует моделированию кинетики ПД в одной «интегральной» ячейке с распределенными гидравлическими параметрами по ее длине (например, «активная зона», «верхняя камера смешения» или «вся совокупность элементов первого контура» и т. д.). Более того, основным отличием данного подхода является независимость точности решения (1.6) от глобального шага по времени, так как решение находится «сквозным образом» по всем ячейкам.

Таким образом, организация структуры взаимодействия аэрозольного модуля с другими модулями интегрального кода может существенно повлиять на эффективность работы кода в целом. В настоящей версии кода

СОКРАТ аэрозольный модуль ПРОФИТ разработан для расчета поведения паров и частиц аэрозолей ПД только в одной выделенной ячейке нодализационной схемы ПК (т. е. аналогично (1.4)).

1.3. Моделирование распределения частиц аэрозоля по размеру

Основными процессами, определяющими образование и изменение размера и состава аэрозольных частиц в элементах ПК, являются фазовые переходы паров ПД (нуклеация, конденсация и испарение), коагуляция частиц и адсорбция продуктов деления из газовой фазы на поверхность. В приближении однокомпонентного состава аэрозольных частиц основное уравнение кинетики аэрозолей может быть представлено в двух (в большинстве случаев эквивалентных) формах, т. е. для непрерывной и дискретной функций распределения [12; 17—20]. Для непрерывной функции распределения частиц по радиусу $n(r, t)$, где величина $n(r, t)dr$ представляет собой общее число частиц в интервале $(r, r + dr)$, кинетическое уравнение имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(r, t)}{\partial t} = S(r, t) - \frac{\partial}{\partial r} [G(r, t)n(r, t)] - R(r, t)n(r, t) + \\ + \frac{1}{2} \int_0^r K(s, r-s)n(s, t)n(r-s, t)ds - n(r, t) \int_0^\infty K(r, s)n(s, t)ds, \end{aligned} \quad (1.7)$$

где $n(r=0, t) = 0$ и $n(r, 0) = n^0(r)$.

В этом уравнении параметр $S(r, t)$ соответствует действию всех возможных источников частиц радиуса r , осредненному по объему данной ячейки. Например, нуклеации (в этом случае $S(r, t) = J(t)\delta(r - r_c)$, где $\delta(r)$ — дельта-функция; $J(t)$ — скорость нуклеации частиц критического размера с радиусом r_c), эмиссии (притоку) частиц из соседних ячеек или отлипания частиц с поверхности. $G(r, t) = dr/dt$ — скорость изменения радиуса частиц вследствие конденсации и испарения различных паров ПД, водяного пара (например, в помещениях защитной оболочки или в холодной ветке парогенератора) либо адсорбции ПД из газовой фазы. $R(r, t)$ — скорость вывода частиц радиуса r из ячейки (например, осаждение на поверхность или переток в другую ячейку вместе с парогазовой средой). $K(r, s)$ — ядро коагуляции между частицами с радиусами r и s , зависящее от действия нескольких механизмов взаимодействия частиц.

Первый интеграл в (1.7) соответствует образованию частиц радиуса r при столкновении двух частиц меньшего радиуса, а второй — их исчезновению при столкновении с любой другой частицей. Главным условием применимости непрерывного приближения является $(r/r_0)^3 \gg 1$, где r_0 — радиус мономеров, составляющих частицу. Другими словами, частицы должны состоять из достаточно большого числа мономеров включая и частицы критического размера при моделировании нуклеации. Еще одним важным упрощением является пренебрежение распадом или фрагментацией частиц, т. е. учитывается только испарение мономеров.

Наибольшие вычислительные трудности при решении уравнений аэрозольной кинетики связаны с моделированием процессов нуклеации, в частности, если используется кинетический подход как альтернатива приближению классической теории нуклеации [17—24]. При этом существенно усложняется структура аэрозольного кода и многократно возрастает время расчета процесса коагуляции при учете многокомпонентного состава аэрозольных частиц. По-видимому, во всех аэрозольных кодах, используемых при анализе тяжелых аварий (в частности, VICTORIA, CONTAIN, MAEROS-MELCOR и SOPHAEROS-ASTEC), при расчете процесса агломерации частиц действие различных механизмов коагуляции предполагается независимым друг от друга. Соответственно полное ядро коагуляции считается равным, например, сумме ядер коагуляции, обусловленных отдельными механизмами. В действительности все механизмы коагуляции взаимосвязаны, и линейная суперпозиция ядер коагуляции в ряде случаев может приводить к заметным ошибкам [23]. Также предполагается, что различные механизмы осаждения частиц действуют независимо друг от друга и полная скорость осаждения частиц аэрозолей определяется на основе принципа суперпозиции, т. е. без учета взаимного влияния отдельных механизмов. Во многих случаях это оправдано, но в целом не соответствует действительности [23].

Для дискретного распределения $n_i(t)$ частиц, состоящих из i мономеров, где $i = 1, 2, 3$ и т. д. и где n_1 соответствует газовой концентрации мономеров (т. е. атомов или молекул конденсирующегося пара), система кинетических уравнений имеет следующий вид (без учета фрагментации частиц):

$$\frac{\partial n_1(t)}{\partial t} = S_1(t) - R_1(t)n_1 - 2(n_1^2 K_{1,1} - E_{2,1}n_2) - \sum_{j=2}^{\infty} (n_1 n_j K_{1,j} - E_{j+1,1} n_{j+1}), \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial n_2(t)}{\partial t} = S_2(t) - R_2(t)n_2 + n_1^2 K_{1,1} - E_{2,1}n_2 + E_{3,1}n_3 - n_2 \sum_{j=1}^{\infty} (1 + \delta_{2,j}) n_j K_{2,j},$$

$$\frac{\partial n_3(t)}{\partial t} = S_3(t) - R_3(t)n_3 + n_1n_2K_{1,2} - E_{3,1}n_3 + E_{4,1}n_4 - n_3 \sum_{j=1}^{\infty} (1 + \delta_{3,j})n_jK_{3,j},$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_4(t)}{\partial t} = & S_4(t) - R_4(t)n_4 + n_1n_3K_{1,3} + n_2^2K_{2,2} - E_{4,1}n_4 + E_{5,1}n_5 - \\ & - n_4 \sum_{j=1}^{\infty} (1 + \delta_{4,j})n_jK_{4,j} \end{aligned}$$

и т. д. вместе с соответствующими начальными условиями. Здесь S_i — источники частиц n_i на единицу объема; $E_{i,1}$ — скорость испарения мономеров i -частицей (т. е. состоящей из мономеров); $K_{i,j}$ — ядро столкновения двух частиц. Конденсация в этом приближении рассматривается как столкновение мономера с частицей. Основным качественным отличием системы (1.8) от приближения (1.7) является отсутствие в явном виде источника нуклеации. Образование частиц в (1.8) начинается непосредственно с образования димера при столкновении двух мономеров. Поэтому применение дискретного подхода предпочтительнее при моделировании процессов с возможным влиянием эффектов кинетики нуклеации на образование частиц, например, при возможной нестационарности в установлении распределения по размеру кластеров докритического радиуса [21]. Примером могут быть течения в выхлопных струях авиационных и ракетных двигателей.

В большинстве случаев решения уравнений (1.7) и (1.8) эквивалентны для концентрации частиц закритического размера. При этом численное решение (1.7) является, по-видимому, более простым и менее затратным по отношению к времени расчета. Однако остается открытым вопрос о применимости классической теории нуклеации для моделирования образования частиц аэрозолей в смеси паров ПД для достаточно специфических условий в АЗ реактора. Поэтому при отсутствии экспериментальных данных очень полезно было бы прямое сравнение результатов расчетов скорости нуклеации с использованием детальной кинетической модели (1.8) и классической теории нуклеации, например, моделей Френкеля — Зельдовича (непрерывное приближение) или Shugard—Heist—Reiss (дискретное приближение) [25].

В общем случае частицы аэрозолей ПД являются многокомпонентными. Это возможно, например, при образовании первичных частиц в АЗ реактора в результате нуклеации паров Cs_2MoO_4 и/или паров оксидов топлива UO_x (при расплавлении топливной матрицы) с последующей гетерогенной конденсацией ниже по потоку паров CsI , $CsOH$, Te и многих других, а также коагуля-

ции смешанных частиц. Существенным фактором является также адсорбция паров воды при охлаждении газа-теплоносителя. В результате частицы одного размера могут иметь различную массу, а значит, и различные коэффициенты столкновения с другими частицами. Вследствие этого существенно усложняется задача моделирования кинетики аэрозольных частиц.

Рассмотрим для примера случай двухкомпонентных частиц, состоящих из соединений с массами m_1 и m_2 . Для непрерывной функции распределения частиц по массам $n(m_1, m_2, t)$ общее кинетическое уравнение при тех же обозначениях, как и в (1.7), имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial n(m_1, m_2, t)}{\partial t} = & S(m_1, m_2, t) - \\ & - \sum_{k=1}^2 \frac{\partial}{\partial m_k} [G_k(m_1, m_2, t)n(m_1, m_2)] - R(m_1, m_2, t)n(m_1, m_2, t) + \\ & + \frac{1}{2} \int_0^{m_1} \int_0^{m_2} K(m_1 - x, m_2 - y; x, y)n(m_1 - x, m_2 - y, t)n(x, y, t)dx dy - \\ & - n(m_1, m_2, t) \int_0^\infty \int_0^\infty K(m_1, m_2; x, y)n(x, y, t)dx dy. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Предполагается, что частицы сферические и однородного состава. Необходимо также определить термодинамику смешения частиц, т. е. зависимость объема частицы от масс соединений ее составляющих. Для случая идеального смешения

$$\begin{aligned} m_p &= m_1 + m_2, \\ v_p &= m_1 / \rho_{p1} + m_2 / \rho_{p2}, \\ \rho_p &= m_p / v_p, \\ d_p &= (6v_p / \pi)^{1/3}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

где ρ_{p1} и ρ_{p2} — плотности индивидуальных («чистых») веществ. В общем случае, например при взаимодействии гигроскопических частиц с парами воды, объем частицы нелинейным образом зависит от масс составляющих компонентов [12], т. е.

$$v_p = f(m_1, m_2). \quad (1.11)$$

Рассмотрим одномерное течение смеси газа-теплоносителя, различных парогазовых компонентов ПД и полидисперсных многокомпонентных частиц аэрозоля в цилиндрическом канале радиуса R , «моделирующем» участок проточного газового канала ПК. Будем учитывать N_G компонентов ПД

в газовой фазе (т. е. компонентов, потенциально конденсирующихся на частицах и поверхностях, а также взаимодействующих со стенками канала посредством адсорбции-десорбции или радиационно-химически активных) и полагать, что частицы аэрозолей состоят из A соединений различной плотности. Уравнение переноса для концентрации некоторого компонента F в газовой или дисперсной фазе в общем виде может быть представлено следующим образом:

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{1}{A(x)} \frac{\partial (A(x)u(x)F)}{\partial x} = Q(F, x, t), \quad (1.12)$$

где Q — обобщенный оператор, описывающий влияние на F различных кинетических процессов и зависящий нелинейным образом от F и других переменных; $A(x)$ — площадь поперечного сечения канала. Функция Q может зависеть в явном виде от времени и длины канала, например при течении газа в АЗ реактора в случае эмиссии определенных продуктов деления из топлива в газовый поток теплоносителя.

Далее, как и в большинстве нодализационных схем РУ, будут рассматриваться модели каналов постоянного сечения (т. е. при $A(x) = \text{const}$) с аппроксимацией (т. е. разбиением) на участки с постоянной скоростью течения $u_i = \text{const}$. В этом случае возможны два подхода к дальнейшему упрощению системы уравнений (1.12): либо предположить стационарность течения и рассматривать изменение $F(x)$ вдоль отдельной траектории, либо рассматривать уравнение для осредненной по длине канала концентрации $\bar{F}(t)$. В первом случае система (1.12) преобразуется к виду

$$u_i \frac{dF}{dx} = Q(F, x), \quad (1.13)$$

где $F(x)$ — текущая концентрация компонента F по длине i -й ячейки канала, и расчет проводится последовательно по всем ячейкам с постоянной «локальной» скоростью течения. Во втором случае система (1.12) преобразуется к виду

$$\frac{d\bar{F}_i}{dt} = \bar{Q}_i + G_i^{\text{in}} - G_i^{\text{out}}. \quad (1.14)$$

Здесь средняя по объему ячейки концентрация компонента F_i определена

выражением $\bar{F}_i = \frac{1}{L_i} \int_0^{L_i} F dx$, а источники конвективного переноса ПД между ячейками, например из i -й в $(i+1)$ -ю, связаны соотношениями

$$G_{i+1}^{\text{in}} = G_i^{\text{out}} = \frac{\bar{F}_i}{\tau_i}.$$

Осредненный кинетический источник $\bar{Q}_i = \frac{1}{L_i} \int_0^{L_i} Q(F, x) dx$. Здесь

$\tau_i = L_i / u_i$ — среднее время пребывания смеси в i -й ячейке канала; L_i

— длина. Значение зависимости $\bar{Q}_i(\bar{F})$ остается неопределенным в данном приближении, поэтому в большинстве моделей консервативно принимается

$$\bar{Q}_i = Q_i(\bar{F}), \quad (1.15)$$

что, по-видимому, является существенной аппроксимацией и требует дополнительного доказательства. Таким образом, система уравнений для изменения средних по сечению i -й ячейки канала концентраций C_k паров ПД, функции распределения $n(m, x)$ частиц аэрозолей по составу, а также масс M_k отложений на единицу поверхности стенок канала может быть представлена в следующем виде ($u = \text{const}$ для данной ячейки):

$$u \frac{dC_k}{dx} = -S_{\text{nucl}} + S_{\text{cond}} - S_{\text{ads}} + S_{\text{des}} + S_{\text{chem}} + S_{\text{in}}, \quad (1.16)$$

$$u \frac{dn(m)}{dx} = P_{\text{nucl}} - \sum_{i=1}^A \frac{\partial}{\partial m_i} [G_i(m)n(m)] - P_{\text{dep}} + P_{\text{remob}} + \\ + \frac{1}{2} \int_0^{m_1} \int_0^{m_2} \dots \int_0^{m_A} K(m-y, y) n(m-y) n(y) dy_1 dy_2 \dots dy_A - \\ - n(m) \int_0^\infty K(m, y) n(y) dy_1 dy_2 \dots dy_A, \quad (1.17)$$

$$\frac{\partial M_k(t, x)}{\partial t} = m_k^0 \frac{R}{2} (S_{\text{ads}} - S_{\text{des}}) + \frac{R}{2} \int_0^\infty m (P_{\text{dep}}(m) - P_{\text{remob}}(m)) dm. \quad (1.18)$$

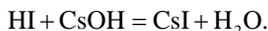
Здесь для удобства записи индекс k опущен в правых частях уравнений, а вектор свойств частиц представлен в символическом виде как $m = \{m_1, m_2, \dots, m_A\}$ или $y = \{y_1, y_2, \dots, y_A\}$. Источниковые слагаемые в (1.16) относятся соответственно к процессам (см. рис. 1) нуклеации и конденсации, осаждения паров на поверхность и десорбции паров с поверхности, радиационно-химических превращений и возможной внешней эмиссии данного компонента в объем канала. Источниковые слагаемые в правой части (1.17) определяют действие на функцию $n(m)$ соответственно процессов нуклеации, конденсации (G_i — скорость роста массы m_i на частице вследствие конденсации i -го соединения), осаждения частиц на поверхность и отлипания частиц с поверхности (particle remobilization), а также коагуляции частиц аэрозоля. Уравнение (1.18) определяет рост слоя поверхностных отложений из адсорбированных газов и осевших частиц k -го сорта. При этом общая масса и объем отложений на единице поверхности канала определяются соотношениями $M_{\text{dep}} = \sum M_k$ и $V_{\text{dep}} = \sum M_k / \rho_{pk}$. Источники в уравнениях определяются соотношениями

$$\begin{aligned}
 S_{\text{nucl}}(k) &= J(N_k, T, m^*)n_k^*, \\
 S_{\text{cond}}(k) &= -\frac{1}{m_k^0} \int_0^{m_1} \int_0^{m_2} \dots \int_0^{m_A} G_k(m)n(m) dm_1 dm_2 \dots dm_A, \\
 G_k &= \left. \frac{dm_k}{dt}(m, T, N_k) \right|_{\text{частица}}, \\
 S_{\text{ads}}(k) &= \frac{S_c}{V_c} V_{\text{ads}}(k)N_k, \\
 P_{\text{nucl}} &= J\delta(m - m^*), \\
 P_{\text{dep}} &= \frac{S_c}{V_c} V_d(m)n(m).
 \end{aligned} \tag{1.19}$$

Здесь функция J — скорость нуклеации частиц аэрозоля критического размера, содержащих n_k^* молекул k -го компонента, зависящая от концентрации k -го компонента в паровой фазе, температуры и состава критического зародыша m^* . Скорость роста массы k -го компонента частицы зависит от ее состава, температуры среды и концентрации компонента в паровой фазе. Скорости адсорбции газов V_{ads} и осаждения частиц V_d определяются несколькими механизмами и более подробно будут рассмотрены

далее в соответствующих разделах. S_c и V_c — соответственно площадь смачиваемой поверхности и объем рассматриваемой ячейки ПК.

В разрабатываемой модели поведения ПД в ПК реактора кинетика газо-фазных химических реакций, моделируемая источником S_{chem} в уравнении (1.16), будет рассматриваться в первую очередь для класса реакций, в которых происходит переход летучих (т. е. неконденсирующихся) ПД в нелетучие, активно участвующие в фазовых переходах. В частности, представляются важными реакции с участием соединений йода, например [4],



Пары HI для условий в ПК не конденсируются на частицах аэрозоля и слабо взаимодействуют с поверхностями в отличие от паров CsI и CsOH, которые активно участвуют в процессах нуклеации, конденсации и осаждения. Источниковый член для концентрации молекул CsI, соответствующий данной реакции, представляется в виде

$$S_{\text{chem}}(\text{CsI}) = k_f[\text{HI}][\text{CsOH}] - k_b[\text{H}_2\text{O}][\text{CsI}],$$

где коэффициенты k_f и k_b являются константами скоростей прямой и обратной химических реакций. Аналогично источники S_{chem} представляются и для других реакций.

Следует отметить, что кинетика радиационно-химических превращений ПД в ПК реактора не учитывается, по-видимому, во всех существующих расчетных интегральных кодах. Обычно используется приближение равновесной химии (т. е. при бесконечно больших скоростях химических реакций). В этом случае практически весь HI консервативно переводится в CsI и далее в дисперсную фазу, что согласно экспериментальным данным может приводить к существенной недооценке содержания йода в газовой фазе. Это, в свою очередь, может повлечь недооценку эмиссии радиоактивных соединений йода в атмосферу вокруг станции при аварийных ситуациях.

2. Модели образования и частиц аэрозолей

Анализ термодинамических условий для образования частиц аэрозолей в АЗ реактора представлен для параметров развития конкретной запроектной аварии. Однако полученные результаты должны быть характерными для большинства запроектных аварий, потенциальная вероятность которых рассматривается при проектировании реакторов АЭС. Исследо-

валась авария с большой двусторонней течью (ДУ-346) вследствие разрыва дыхательного трубопровода компенсатора давления при работе реакторного блока на номинальной мощности (расчет проводился с помощью кода СОКРАТ [16]).

Для количественной оценки образования частиц аэрозолей из молекул и атомов ПД необходимо прежде всего определить, какие соединения ПД и в каком количестве выходят из топлива в ПК в паровой фазе. Затем важно определить, какие соединения паров ПД с точки зрения термодинамики могут образовывать новые частицы аэрозолей, т. е. приводить к нуклеации, а какие в основном будут только конденсироваться на уже существующих в газе частицах.

На рис. 5 в качестве примера показан моделируемый селективный выход наиболее важных для конденсации ПД в АЗ реактора (50-ю ячейку центрального «нодализационного канала» core_121 — см. рис. 2) в результате развития аварии ДУ-346.

Видно, что эмиссия паров ПД происходит достаточно локально и неоднородно по времени и соответствует парам цезийсодержащих компонентов Cs_2MoO_4 , Cs и CsI, а также паров Te. При этом вследствие специфики термодинамических свойств (см. далее рис. 6) образование мельчайших частиц аэрозоля из радиоактивных ПД определяется преимущественно гомогенной нуклеацией паров Cs_2MoO_4 и паров оксидов топлива (в случае, если происходит выход соединений урана в паровой фазе в газовую среду теплоносителя). В то же время дальнейший рост частиц аэрозоля зависит от совместной (многокомпонентной) конденсации паров Cs_2MoO_4 , CsI, Te, CsOH и, возможно, других ПД. В результате образуются частицы смешанного химического состава. При этом существенным фактором является распределение температуры газа-теплоносителя в элементах АЗ и ВКС.

На рис. 6 приведены данные по давлению насыщения в зависимости от температуры для наиболее важных паров ПД с точки зрения нуклеации частиц аэрозолей. На рис. 7 показано моделируемое распределение температуры по потоку паров воды в АЗ и ВКС ПК (см. рис. 2) для двух характерных моментов времени развития аварии.

Видно, что пары цезий-молибдата являются одним из наиболее существенных аэрозолеобразующих компонентов в смеси паров радиоактивных ПД. Данный источник нуклеации частиц аэрозолей в активной зоне является, по-видимому, основным на начальной стадии аварийного разогрева реактора при сравнительно не очень высоких температурах (порядка 1000—2000 К) и, следовательно, слабой аэрозолеобразующей активности паров оксидов топливной матрицы (например, UO_2 или U_3O_8), паров металлов контрольного стержня и элементов металлических конструкций.

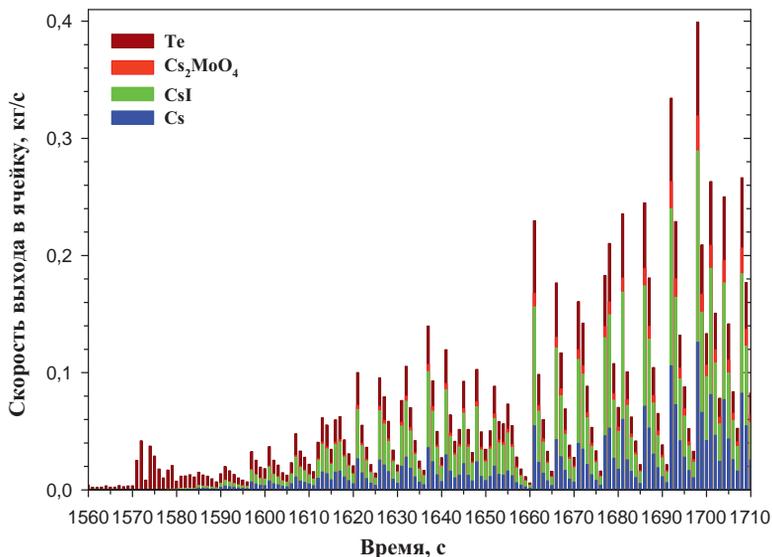


Рис. 5. Селективный выход паров ПД в ячейку 50 на интервале 26,0—28,5 мин, моделируемый для аварии ДУ-346 с помощью интегрального кода СОКРАТ

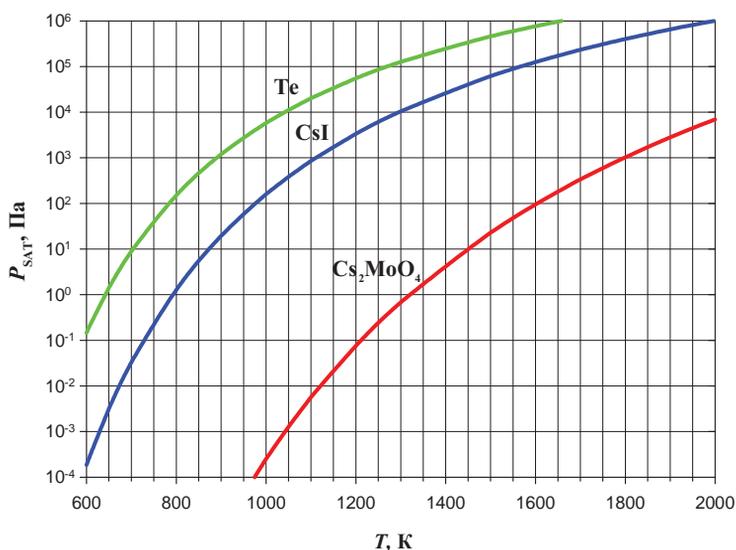


Рис. 6. Давление насыщения наиболее важных для образования частиц аэрозолей паров ПД в зависимости от температуры [26]

При этом пары других радиоактивных ПД (например, CsI, CsOH, Te и т. д.) определяют конденсационный рост частиц и формирование многокомпонентных частиц с различной степенью радиационной активности. Расчеты для паров CsI и Te показали, что для этих компонентов плотность пара в АЗ недостаточна для инициирования процесса гомогенной нуклеации. В то же время плотность паров Cs, CsI, CsOH и Te достаточна для конденсации на частицах аэрозоля, образовавшихся в смеси в результате нуклеации паров Cs_2MoO_4 и оксидов урана топливной матрицы.

Таким образом, процессы нуклеации и многокомпонентной конденсации паров ПД в ПК зависят как от интенсивности выхода конкретных паров ПД из топлива, так и от скорости конвективного переноса ПД, а также в целом от динамики развития аварии. Применяемое в настоящее время в интегральных кодах приближение равновесной модели фазовых переходов, как и консервативное задание размеров образующихся в результате нуклеации частиц аэрозолей является, по-видимому, достаточно грубым приближением.

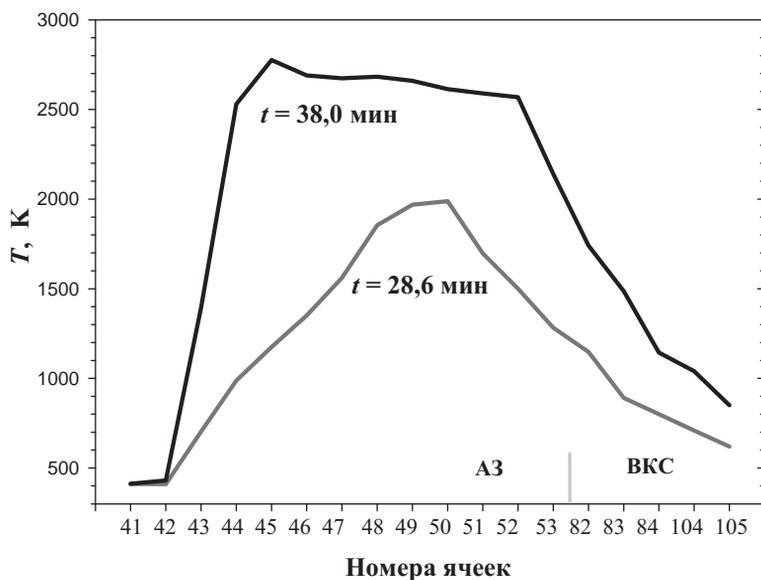


Рис. 7. Распределение температуры по ячейкам активной зоны и верхней камеры смешения реактора для двух характерных моментов времени моделируемого развития аварии ДУ-346

2.1. Модели нуклеации

По определению скорость нуклеации $I(N_v, T, \dots)$ определяет стационарную скорость образования частиц критического размера для данных концентрации пара N_v и температуры T , а также, возможно, других параметров состояния системы [12; 22; 27]. В классической теории размер критического зародыша определяется условием равенства скоростей испарения и конденсации мономеров пара (т. е. атомов или молекул) для такой частицы. При этом возможны различные аналитические представления для скорости нуклеации частиц критического размера как функции параметров состояния системы. Точность аналитических аппроксимаций для скорости нуклеации определяется либо сравнением с прямыми экспериментальными данными (для большинства паров радиоактивных ПД такие данные отсутствуют), либо сравнением с результатами более точных теоретических моделей.

Одной из альтернатив классической теории нуклеации является кинетический подход, в котором не используются понятия критического зародыша и скорости нуклеации. В этом приближении моделирование кинетики образования и распада частиц проводится для всей цепочки кластеров: от мономеров, димеров и т. д. до «макрочастиц», для которых в силу их достаточно «большого» размера влияние испарения мономеров уже несущественно и которые заведомо могут рассматриваться как центры гетерогенной конденсации. Качественная схема кинетики образования и деструкции кластеров и частиц аэрозолей в неравновесной (пересыщенной) смеси мономеров представлена на рис. 8.

При моделировании нуклеации в условиях реальной атмосферы или различных практических приложений учет детальной кинетики, т. е. от столкновений мономеров и кластеров до образования частиц критического размера, затруднителен из-за больших затрат машинного времени на решение полной системы «жестких» кинетических уравнений. Поэтому в большинстве моделей применяется приближение классической теории нуклеации, позволяющее непосредственно вычислять скорость образования частиц критического размера как функцию макроскопических параметров состояния системы «пар — жидкость». При этом очень важно показать адекватность решений для спектра размеров образующихся частиц при рассмотрении полной системы кинетических уравнений и упрощенной модели динамики образования частиц аэрозолей в приближении классической теории нуклеации.

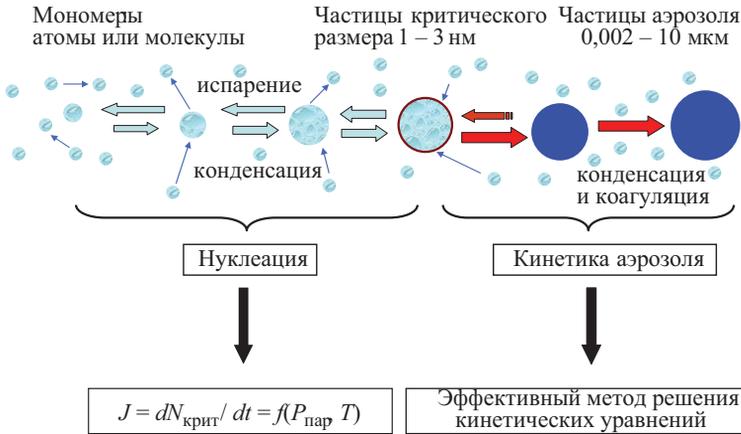


Рис. 8. Схематическое представление кинетики образования и деструкции кластеров и частиц в неравновесной (пересыщенной) смеси мономеров

В кинетическом приближении образование и рост частиц рассматриваются как последовательность парных столкновений между мономерами (в результате образуются димеры), мономерами и димерами (образуются тримеры), мономерами и кластерами и т. д. до столкновений между кластерами (т. е. коалесценция кластеров), как схематически показано на рис. 8. Обратный процесс рассматривается как испарение мономеров или распад кластеров на два кластера меньшего размера. Под размером кластера здесь понимается количество составляющих его мономеров, так как геометрический размер кластера не всегда может быть определен в силу его фрактальности. Большие кластеры, содержащие несколько десятков частиц, могут рассматриваться как мельчайшие частицы аэрозолей. Основная система кинетических уравнений, описывающих эволюцию кластеров C_a , содержащих a -мономеров, имеет следующий вид [12; 21; 28]:

$$\frac{dC_a}{dt} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^a [K_{a-j,j} C_{a-j} C_j - E_{a,j} C_a] + \frac{1}{2} [K_{a/2,a/2} C_{a/2} C_{a/2} - E_{a,a/2} C_a]_{a=\text{четное}} - \sum_{j=1}^{\infty} [K_{a,j} C_a C_j - E_{a+j,j} C_{a+j}] - [K_{a,a} C_a C_a - E_{2a,a} C_{2a}]. \quad (2.1)$$

В этом уравнении коэффициенты $K_{a,j}$ соответствуют эффективной скорости столкновения кластеров, содержащих a - и j -мономеров. Коэффици-

енты $E_{a,j}$ соответствуют скорости распада кластера C_a на два кластера C_{a-j} и C_j и определяются обычно из принципа детального равновесия, справедливого для систем, находящихся в состоянии устойчивого термодинамического равновесия [12; 22]:

$$E_{a,j} = K_{a-j,j} \frac{C_{a-j}^{\text{eq}} C_j^{\text{eq}}}{C_a^{\text{eq}}},$$

где C_j^{eq} — равновесная концентрация кластеров с j -мономерами. В частности, при испарении мономеров коэффициент испарения $E_{a,1}$ определяется следующим образом:

$$E_{a,1} = K_{a-1,1} C_1^{\text{eq}} \exp\left(-\frac{\Delta G_{a-1,a}^0}{kT}\right),$$

где $\Delta G_{a-1,a}^0$ — стандартная энергия Гиббса образования кластеров « a » в реакции присоединения мономеров, т. е. « $a-1$ » + « 1 » = « a »; C_1^{eq} — равновесная концентрация мономеров в системе для данных термодинамических условий. Важно отметить, что в общем случае равновесная концентрация мономеров не равна действительной концентрации мономеров в системе в данном состоянии, т. е. $C_1^{\text{eq}} \neq C_1$ (скорее существенно отличается), и должна определяться через соответствующее термодинамическое соотношение.

В кинетическом приближении скорость нуклеации J_{kin} определяется как поток кластеров через «границу системы», которая равна максимальному значению размера кластеров M , учитываемого в системе уравнений (2.1) [28]:

$$J_{\text{kin}} = \sum_{i=1}^M \sum_{j=M-i+1}^M C_i^{\text{st}} C_j^{\text{st}} K_{i,j}, \quad (2.2)$$

где концентрации C_a^{st} соответствуют стационарному решению системы. При этом выбор конкретного значения M (достаточно произвольный) должен соответствовать условию $M > a^*$, т. е. кластеры этого размера находятся в закритической области, и, следовательно, для них влияние испарения незначительно (точнее, не является доминирующим). В этом случае расчет J_{kin} не зависит от выбора конкретного значения M , если в системе доминирующими являются столкновения типа «мономер — кла-

стер». Также (только в этом случае и дополнительно при выполнении условия стационарности для концентрации кластеров) скорость нуклеации, определяемая в классической термодинамической теории нуклеации (J , см. рис. 8), соответствует кинетическому определению.

Данное определение скорости нуклеации является наиболее общим и учитывает как «одноквантовые», так и «многоквантовые» переходы кластеров по оси размеров [21; 28]. Однако при расчете J_{kin} применительно к нуклеации паров ПД в элементах РУ требуется численное решение системы нелинейных уравнений (2.1), что в большинстве случаев связано со значительными затратами машинного времени. Поэтому необходимо дальнейшее упрощение этой системы для нахождения аналитического решения при определенных условиях.

При учете столкновений и распада кластеров с участием только мономеров (т. е. с учетом только коэффициентов вида $K_{a,1}$ и $E_{a,1}$) система (2.1) преобразуется к стандартному виду, составляющему основу классической теории нуклеации [12; 22]:

$$\frac{dC_a}{dt} = J_{a-1} - J_a = (K_{a-1,1} C_{a-1} C_1 - E_{a,1} C_a) - (K_{a,1} C_a C_1 - E_{a+1,1} C_{a+1}). \quad (2.3)$$

В системе (2.3) учитываются только «одноквантовые» переходы кластеров по оси размеров. Стационарное C_a^{st} и равновесное C_a^{eq} решения (2.3) определяются соответственно условиями $J_{a-1} = J_a = \text{const} = J$ (nucleation) и $J_{a-1} = J_a = 0$ для всех $a \leq M$. В результате аналитическое решение для скорости нуклеации в дискретном приближении классической теории нуклеации J имеет следующий вид [12; 22; 25] (Schugart—Heist—Reiss approach):

$$J_{\text{SHR}} = \left[\sum_{a=1}^M (C_a^{\text{eq}} C_1^{\text{eq}} K_{a,1})^{-1} \right]^{-1}, \quad (2.4)$$

где равновесные концентрации кластеров связаны между собой известным термодинамическим соотношением

$$\frac{C_a^{\text{eq}}}{C_{a-1}^{\text{eq}}} = C_1^{\text{eq}} \exp \left(- \frac{\Delta G_{a-1,a}^0}{RT} \right). \quad (2.5)$$

Здесь $\sum_{a=1}^M aC_a^{\text{eq}} = C_{\text{tot}}$; C_{tot} — общая концентрация мономеров в системе;

$\Delta G_{a-1,a}^0$ — изменение стандартной энергии Гиббса образования кластеров C_a из кластеров C_{a-1} ; R — универсальная газовая постоянная.

Таким образом, вычисление скорости нуклеации сводится к нахождению равновесных решений системы с использованием термодинамического соотношения (2.5) и какой-либо модели для вычисления термодинамических параметров кластеров. В частности, при отсутствии экспериментальных данных может быть использована известная жидкокапельная модель [12; 22]. В ней термодинамика образования кластеров представлена как функция макроскопических параметров системы — давления насыщения паров над плоской поверхностью жидкости и энергии поверхностного натяжения жидкости при известных массе и объеме мономера конденсирующегося вещества. Дальнейшее упрощение вычислительной процедуры для скорости нуклеации возможно при переходе от дискретного приближения к непрерывному распределению кластеров по размеру. В этом случае суммирование по заселенностям кластеров в (2.4) можно заменить интегрированием и затем аппроксимировать подынтегральную функцию первыми тремя членами разложения в ряд Тейлора. В результате выражение для скорости нуклеации принимает следующий вид (Girshik approach — [11; 12]):

$$J_G = v_1 \left(\frac{2\sigma}{\pi m_1} \right)^{1/2} \frac{N_v^2}{S} \exp \left(\theta - \frac{4\theta^3}{27(\ln S)^2} \right), \quad (2.6)$$

где $\theta = \sigma s_1 / kT$ — безразмерная поверхностная энергия; σ — энергия поверхностного натяжения жидкости; N_v — концентрация мономеров конденсирующегося пара; $S = N_v / N_s$, $N_s(T)$ — концентрация мономеров насыщенного пара при температуре T ; m_1 , v_1 и s_1 — соответственно масса, объем и площадь поверхности мономера. Выражение (2.6) является прямым следствием кинетического приближения при ряде упрощений и отличается от классического представления множителем e^{θ} / S .

Очевидно, что выражение (2.6) проще и экономичнее с точки зрения затрат машинного времени, чем (2.4), и тем более, чем численное решение (2.1) или (2.2). Однако остается открытым вопрос относительно точности этого приближения применительно к условиям нуклеации паров ПД в активной зоне и первом контуре в условиях сильной неравновесности (т. е. при очень высоких значениях пересыщения $S \gg 1$). Поэтому в отсутствие каких-либо экспериментальных данных по нуклеации радиоактивных па-

ров ПД представляется необходимым прямое сравнение решений (2.1), (2.4) и (2.6) для специфических термодинамических условий, формирующихся при разгерметизации активной зоны реактора, и наиболее важных соединений с точки зрения нуклеации частиц аэрозолей, например паров таких ПД, как Cs_2MoO_4 , CsI , $CsOH$ и Te , окислов топлива UO_2 , также паров металлов контрольного стержня и конструкционных материалов. Кроме того, интересно оценить вклад в образование новых частиц аэрозолей различных элементов реактора при выходе ПД из топлива в газовую среду теплоносителя, таких как активная зона, верхняя камера смешения и различные участки первого контура охлаждения.

Следует отметить, что приведенные формулы описывают процесс нуклеации в однокомпонентном паре. Случаи бинарной или многокомпонентной нуклеации даже в рамках классической теории описываются существенно более сложными выражениями [21; 22]. Помимо этого остаются во многом неизвестными состав и особенно термодинамика смесей паров ПД. Поэтому представляется нецелесообразным на данном этапе включать механизм многокомпонентной нуклеации, как и иониндуцированной нуклеации, в расчетный модуль кинетики и переноса аэрозолей в первом контуре реактора.

В качестве примера ниже рассмотрено прямое сравнение результатов расчетных формул классической теории гомогенной нуклеации — (2.4) и (2.6) — и численного решения системы кинетических уравнений (2.3) для ряда модельных задач по образованию частиц аэрозоля в элементах РУ. Основная цель сравнения — верификация приближений (2.4) и (2.6) для моделирования нуклеации частиц аэрозоля ПД в АЗ и ВКС реактора с последующим включением соответствующего расчетного модуля в аэрозольный блок интегрального кода.

Тест 1. Рассматривается модельная задача образования частиц аэрозоля в ячейке при заданной начальной концентрации молекул пара Cs_2MoO_4 (молекулярный вес 425,75 г/моль), постоянной температуре и отсутствии дополнительной эмиссии пара в ячейку.

Система кинетических уравнений образования и конденсационного роста кластеров, соответствующая данной задаче, имеет вид (см. (2.3))

$$\begin{aligned} \frac{dC_a}{dt} &= J_{a-1} - J_a, \\ C_1(t=0) &= N_G, \\ C_{a>1}(t=0) &= 0. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Здесь индекс $a = 1, 2, 3, \dots, A_{\max}$ соответствует количеству молекул, составляющих частицу, где A_{\max} — максимальный размер системы, рассматриваемой при численном моделировании. Выбор значения A_{\max} является относительно произвольным при условии, что A_{\max} превышает количество молекул в частице критического размера $a_{\text{кр}}$. В расчетах обычно полагаются $A_{\max} = a_{\text{кр}} + 1$ [21; 22]. Слагаемые в правой части (2.7) определяют кинетику столкновений «молекула — кластер» и испарение кластеров (см. (2.1)—(2.3)). Формулы для вычисления соответствующих коэффициентов столкновений в приближении молекулярно-кинетической теории газов приведены в подразделах 2.3 и 2.4. Параметр N_G соответствует начальной концентрации молекул пара в системе.

На рис. 9 представлены результаты численного решения системы уравнений (2.7) применительно к нуклеации пара Cs_2MoO_4 в ячейке для следующих параметров расчета: $T = 1280$ К, $P = 3,4$ атм (давление газотеплоносителя в ячейке), $N_G = 10^{15}$ см⁻³. Показана эволюция в зависимости от времени концентрации N_p частиц с диаметром, превышающим 3 нм, а также скорости изменения концентрации этих частиц.

Важно отметить, что для данных параметров и времени расчета влияние процесса коагуляции кластеров и частиц на изменение их концентрации несущественно. Этот вывод получен в результате прямого сравнения решений систем уравнений (2.7) и (2.1). Поэтому при $d_{\text{кр}} < 3$ нм, где $d_{\text{кр}}$ — диаметр кластера критического размера (1,5 нм в данном случае), скорость накопления частиц в единице объема газа должна по определению соответствовать «реальной» скорости нуклеации для данных условий, т. е. $J_{\text{кин}} = dN/dt$. Видно, что за время порядка $5 \cdot 10^{-5}$ с зависимость $J_{\text{кин}}(t)$ выходит на стационарное значение порядка $J = 5 \cdot 10^{12}$ см⁻³с⁻¹. Это время является характерным временем установления стационарного распределения заселенностей кластеров $\tau_{\text{ст}}$ и определяет область применимости классической теории нуклеации для процессов с нестационарным изменением газодинамических параметров. Например, на временах, больших $6 \cdot 10^{-4}$ с (т. е. значительно больше $\tau_{\text{ст}}$), начинает сказываться истощение мономеров в системе вследствие образования и роста кластеров. Поэтому скорость нуклеации уменьшается. Расчет по формулам (2.4) и (2.6) приводит к близким по порядку величины значениям скорости нуклеации, а именно $J_{\text{SHR}} = 4,9 \cdot 10^{12}$ и $J_G = 5,9 \cdot 10^{13}$ см⁻³с⁻¹. Отметим, что расчет по (2.4) является относительно более громоздким, чем по (2.6), так

как требуется вычисление равновесных заселенностей докритических кластеров. Таким образом, представляет интерес дальнейшее исследование применимости аналитических аппроксимаций для скорости нуклеации по сравнению с прямым численным решением соответствующих кинетических уравнений для более реальных случаев.

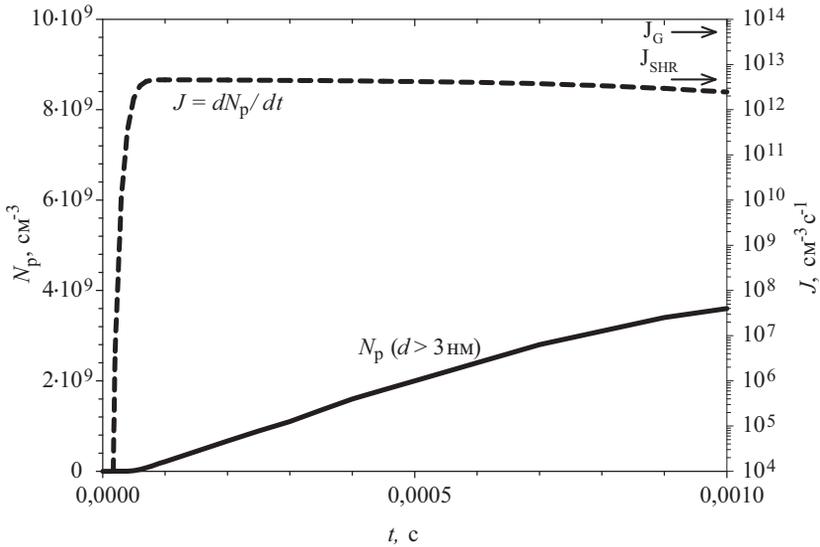


Рис. 9. Нуклеация, тест 1. Изменение в зависимости от времени концентрации N_p и скорости образования J частиц с диаметром $d > 3$ нм, где $J = dN_p/dt$, полученное в результате решения системы уравнений (2.7) для следующих параметров расчета кинетики нуклеации пара Cs_2MoO_4 в ячейке: начальная концентрация молекул $N_G = 10^{15} \text{ см}^{-3}$, температура $T = 1280$ К при отсутствии дополнительной эмиссии пара в ячейку

Тест 2. Рассматривается нуклеация частиц аэрозоля в паре Cs_2MoO_4 в ячейке нодализационной схемы АЗ реактора ВВЭР-1000, принятой в коде СОКРАТ применительно к условиям аварии ДУ-346. Речь идет о модельной задаче образования частиц аэрозоля в ячейке 53 канала-121 для времени развития аварии порядка 26—30 мин (см. рис. 2 и 3). Характерные значения температуры газа в ячейке, скорости протока газа через ячейку и интенсивности эмиссии массы пара Cs_2MoO_4 (молекулярный вес 425,75 г/моль) в ячейку: $T = 1280$ К, $V_G = 1\text{—}10$ м/с и $Q_M = 0,01\text{—}0,1$ кг/с. Параметры ячейки: объем $V = 1,21 \text{ м}^3$, длина $L = 0,4$ м. Следовательно, характерное время пребывания пара в ячейке τ составля-

ет $L/V_G = 0,04—0,4$ с, а интенсивность эмиссии молекул пара в ячейку $Q_N = 10^{16}—10^{17}$ молекул/(см³с). В результате стационарное значение суммарной концентрации молекул пара в ячейке $N_{v-st} = Q_N \tau = 4 \cdot 10^{14}—4 \cdot 10^{16}$ см⁻³.

Система кинетических уравнений для концентраций кластеров, соответствующая данной задаче, имеет следующий вид (см. определения к системе уравнений (2.3)):

$$\frac{dC_a}{dt} = Q_N \delta_{a,1} - \frac{C_a}{\tau} + J_{a-1} - J_a. \quad (2.8)$$

Здесь индекс a соответствует количеству молекул, составляющих частицу, где $a = 1, 2, 3, \dots, A_{\max}, A_{\max} G, A_{\max} G^2, A_{\max} G^3$ и т. д. до максимального «размера» частиц, рассматриваемого при численном моделировании, т. е. частиц с диаметром порядка 1 мкм в данном примере при $A_{\max} = 20$ и $G = 1,05$. Первое слагаемое в правой части (2.8) соответствует объемному источнику эмиссии молекул пара в ячейку вследствие разгерметизации оболочки твэлов, второе — уносу молекул и кластеров из ячейки вместе с несущим газом, два последних слагаемых определяют кинетику столкновений «молекула — кластер» и испарение кластеров.

При решении этой же задачи в приближении классической теории нуклеации система уравнений динамики частиц аэрозоля несколько видоизменяется по сравнению с (2.8), а именно рассматриваются два источника — для молекул пара в ячейке (Q_N) и для частиц аэрозоля критического размера (J). При этом скорость нуклеации зависит от текущих значений термодинамических параметров в ячейке. В этом случае система уравнений для концентрации молекул пара и частиц аэрозоля имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{dC_1}{dt} &= Q_N - A_{cr} J - \frac{C_1}{\tau} - C_1 \sum K_{1,a} C_a, \\ \frac{dC_a}{dt} &= J \delta_{a,A_{cr}} - \frac{C_a}{\tau} + J_{a-1} - J_a. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Здесь A_{cr} — количество молекул пара в частице критического размера; C_1 — концентрация молекул пара; $K_{1,a}$ — коэффициент конденсации молекул пара на частицах. Основным отличием (2.9) от (2.8) является отсутствие учета кинетики образования докритических частиц. Тем не менее появление таких частиц в объеме газа возможно в результате испарения при соответствующем изменении термодинамических параметров в ячейке

(например, при повышении температуры газа или истощении молекул пара вследствие конденсации на крупных частицах). Для удобства анализа решение систем уравнений (2.8) и (2.9) проводилось на одинаковой сетке «размеров частиц». Результаты расчетов представлены на рис. 10 для следующих параметров: $T = 1280$ К, $P = 3,4$ атм (давление газа-теплоносителя в ячейке), эмиссия пара в ячейку $Q_M = 0,1$ кг/с и $V_G = 3,9$ м/с, т. е. характерное время τ пребывания газа в ячейке составляет порядка 0,1 с. Показано изменение в зависимости от времени концентрации частиц с диаметром, превышающим 3 нм (N_p), и среднего размера частиц (D_p) для трех моделей расчета скорости нуклеации, а именно детальной кинетической модели и двух приближений для модели классической теории нуклеации — дискретного (2.4) и непрерывного (2.6).

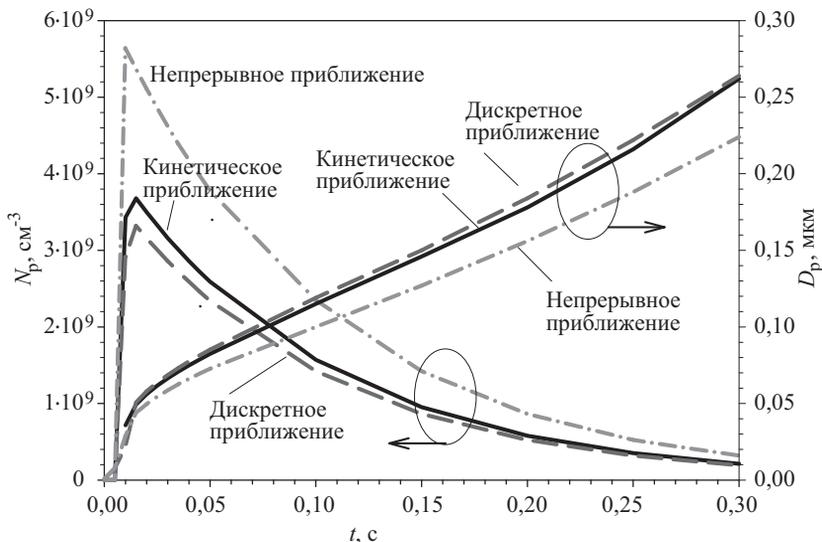


Рис. 10. Нуклеация, тест 2. Изменение в зависимости от времени концентрации (левая ордината) и среднего диаметра частиц (правая ордината) для различных моделей расчета скорости нуклеации: детальное кинетическое приближение (2.8) (сплошные линии), дискретное приближение классической теории нуклеации (2.4) и (2.9) (штриховые линии), непрерывное приближение классической теории нуклеации (2.6) и (2.9) (штрихпунктирные линии). Параметры расчета: $T = 1280$ К, $\tau = 0,1$ с, эмиссия массы пара в ячейку $Q_M = 0,1$ кг/с или счетная эмиссия молекул пара в единицу объема ячейки $Q_N = 1,2 \cdot 10^{17}$ молекул/ $(\text{см}^3 \text{с})$

Из представленных распределений следует, что классическая модель нуклеации в дискретном приближении (штриховые линии на рис. 10) позво-

ляет довольно хорошо моделировать интегральные характеристики спектра частиц. Несколько худшее соответствие получено для классической модели нуклеации в непрерывном приближении. Однако даже в этом случае отличие от решения кинетической модели составляет только несколько десятков процентов.

Распределение по размеру частиц аэрозоля для времени расчета $t = 0,5$ с и различных моделей расчета скорости нуклеации показано на рис. 11 (начальные параметры и обозначения такие же, как на рис. 10).

Видно, что применение моделей классической теории нуклеации с целью уменьшения затрат «машинного» времени на расчет кинетики образования частиц в пересыщенном паре позволяет тем не менее достаточно хорошо моделировать весь спектр размеров частиц по сравнению с детальной кинетической моделью. Образование двух мод в спектре размеров частиц обусловлено динамикой изменения концентрации пара в ячейке. На временах $t < \tau = 0,1$ с (характерное время конвективного уноса газа из ячейки) концентрация пара в ячейке непрерывно увеличивается и, как следствие, образуется мода более крупных частиц. В дальнейшем устанавливается равновесие между притоком пара в ячейку и его уносом из ячейки с несущим газом (на временах $t > 2\tau$). При этом устанавливается суммарная концентрация молекул в ячейке, т. е. в паровой и дисперсной фазах, порядка τQ_N . Кроме того, конденсация пара на образовавшихся ранее частицах приводит к дополнительному истощению пара в ячейке. В результате новые частицы растут с меньшей скоростью и, как следствие, образуется мода более мелких частиц.

На рис. 12 показан моделируемый спектр размеров образующихся частиц аэрозоля в зависимости от применяемой степени детализации расчетной сетки по оси размеров (начальные параметры и обозначения такие же, как на рис. 10). Результаты соответствуют времени расчета $t = 0,5$ с.

Для каждого варианта указаны общее количество размерных фракций и коэффициент увеличения размера фракции в соответствии с геометрической прогрессией. А именно $A(i) = A(i-1)G$, где i — номер фракции;

$A(i)$ — количество молекул в частице данной фракции при условии, что

$A(i) - A(i-1) \geq 1$ и $A(1) = 1$, $A(2) = 2$, $A(3) = 3$, $A(4) = 4$, $A(5) = 5$.

Видно, что результаты моделирования с использованием фракционного подхода существенно зависят от количества фракций. Более грубое разбиение приводит к существенному «искусственному» уширению моделируемого спектра размеров частиц.

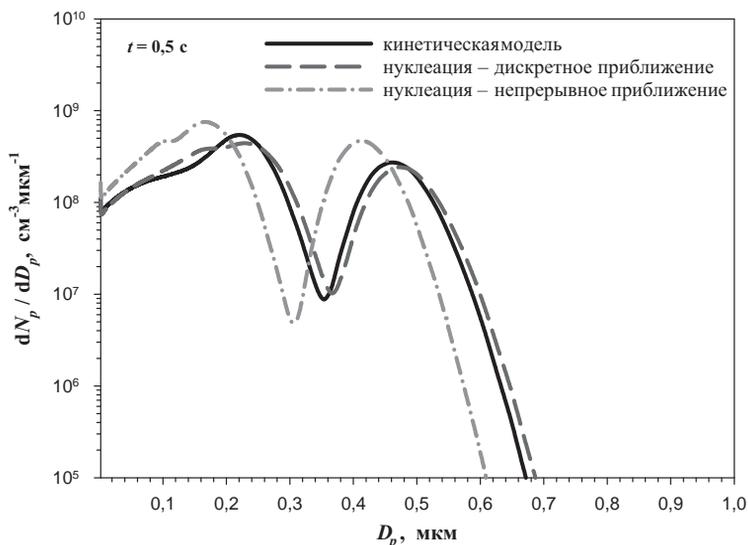


Рис. 11. Нуклеация, тест 2. Распределение по размеру частиц аэрозоля для различных моделей расчета скорости нуклеации. Результаты соответствуют времени расчета $t = 0,5$ с

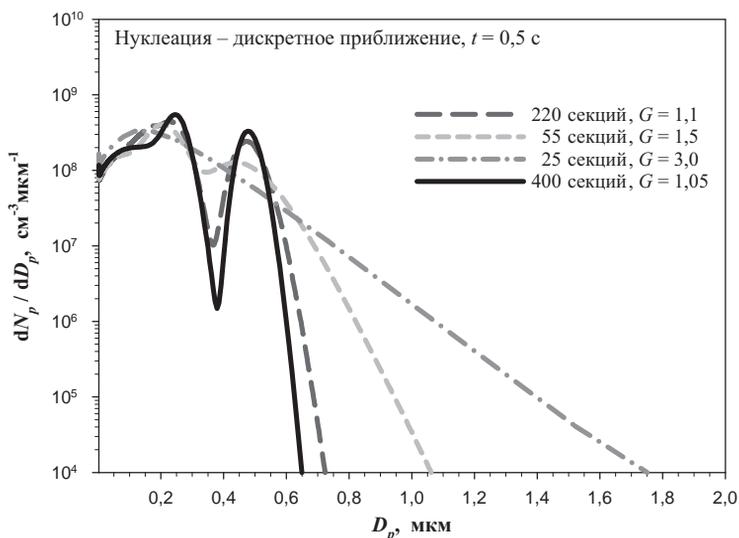


Рис. 12. Нуклеация, тест 2. Моделируемый спектр размеров частиц аэрозоля в зависимости от степени детализации расчетной сетки по оси размеров

2.2. Конденсация паров радиоактивных ПД

Поток молекул пара I_i на частицу радиуса r_i (т. е. количество молекул, конденсирующихся на частице за единицу времени) в общем виде определяется выражением [12]

$$I_i = 4\pi r_i D_v f_K \alpha_c (N_v - N_{si}), \quad (2.10)$$

где

$$N_{si} = N_s(T, x_v) \text{Ke}(r_i);$$

$$\text{Ke} = \exp\left(\frac{2\sigma v_1}{kTr_i}\right);$$

$$f_K = \frac{1 + \text{Kn}_i}{1 + 1,71\text{Kn}_i + 4/3\text{Kn}_i^2};$$

$$\text{Kn}_i = \lambda_v / r_i.$$

Здесь D_v — коэффициент диффузии пара в несущей газовой среде при температуре T ; N_v — текущая концентрация молекул пара; N_s — равновесная концентрация пара над плоской поверхностью жидкости при температуре и составе частицы; x_v — мольная концентрация пара в жидкой или твердой фазе частицы. Экспоненциальный множитель Ke в формуле для N_{si} соответствует поправке Кельвина на кривизну капли. Параметр f_K — фактор коррекции на размер частицы вследствие эффекта Фукса, где Kn_i — число Кнудсена для данной частицы; λ_v — длина свободного пробега молекул пара в несущей газовой среде. Параметр α_c — коэффициент конденсации, который в отсутствие каких-либо экспериментальных данных для молекул пара продуктов деления обычно полагается равным единице.

Из (2.10) следует, что уравнение для изменения массы i -й частицы может быть представлено в виде

$$\frac{dm_i}{dt} = G_i = m_v I_i(N_v, r_i), \quad (2.11)$$

где m_v — масса молекулы конденсирующегося пара и для наглядности показана зависимость скорости роста частицы от концентрации пара и

размера частицы. Также из (2.10) следует, что поток конденсирующегося пара на частицы радиуса r_i и концентрации N_i (т. е. i -й фракции) в предположении $N_v \gg N_{si}$ (т. е. пренебрежение испарением частиц, например для нелетучего пара) определяется уравнением

$$S_{\text{cond}}(i) = -\frac{3M_{pi}D_v f_K}{r_i^2 \rho_p V_c}, \quad (2.12)$$

где $M_{pi} = N_i m_i V_c$ — общая масса частиц i -й фракции в ячейке с объемом V_c ; ρ_p — плотность вещества частиц. Именно в таком приближении конденсация паровых компонентов рассматривается в расчетном модуле SOPHAEROS интегрального кода ASTEC [5].

При моделировании конденсации паров ПД в элементах РУ приближение (2.12) применимо лишь для условий сравнительно невысоких температур (например, при $T < 1000$ К) и для размера частиц $d_i = 2r_i > 0,1$ мкм (так как только в этом случае фактор Ke порядка единицы). Поэтому данное приближение нецелесообразно использовать для моделирования процессов аэрозольной кинетики в каналах активной зоны, где температура достигает 2000 К и более, а также при расчете конденсационного роста первичных частиц сразу после нуклеации, т. е. в диапазоне размеров частиц порядка 1—30 нм, когда $Ke \gg 1$.

При коагуляции частиц без учета гидродинамических эффектов и влияния турбулентности в наиболее простом для моделирования случае — диффузионном приближении (т. е. при выполнении условия $Kn_{g,i} \ll 1$; подробнее см. далее) — коэффициент броуновской коагуляции между частицами (кластерами) радиусов R_i и R_j определяется выражением [12]

$$K_{i,j}^{B,d} = 4\pi(R_i + R_j)(D_{p,i} + D_{p,j}), \quad (2.13)$$

где $D_{p,i}$ и $D_{p,j}$ — коэффициенты диффузии частиц в газе, вычисляемые с учетом поправки Каннингема на размер частицы

$$D_{p,i} = \frac{kT}{6\pi R_i \mu_g} G_i, \\ G_i = 1 + Kn_{g,i} \left[A + B \exp(-C / Kn_{g,i}) \right].$$

Здесь k — постоянная Больцмана; μ_g — коэффициент динамической вязкости несущей газовой среды; $\text{Kn}_{g,i}$ — число Кнудсена для частицы R_i в газе с длиной свободного пробега молекул λ_a :

$$\text{Kn}_{g,i} = \frac{\lambda_a}{R_i};$$

A, B, C — аппроксимирующие константы ($A = 1,249$, $B = 0,42$, $C = 0,87$). Диффузионный режим столкновений между частицами в газовой среде реализуется при условии $\text{Kn}_{g,i} \ll 1$, т. е. для достаточно крупных частиц. В частности, для характерных условий в АЗ и ВКС реактора это условие примерно соответствует размеру частиц $2R_i = D_i > 0,05\text{—}0,3$ мкм.

В свободномолекулярном режиме столкновений, т. е. при выполнении условия $\text{Kn}_{g,i} \gg 1$, скорость столкновений между частицами определяется средней скоростью теплового движения частиц в соответствии с молекулярно-кинетической теорией газов (применимо также для моделирования межмолекулярных столкновений и столкновений молекула-частица, т. е. конденсации):

$$K_{i,j}^{B,f} = \pi(R_i + R_j)^2 (V_{p,i}^2 + V_{p,j}^2)^{1/2},$$

$$V_{p,i} = \left(\frac{8kT}{\pi m_i} \right)^{1/2},$$

где $V_{p,i}$ — скорость теплового движения частицы массы m_i в газе с температурой T .

В общем случае (т. е. в переходном режиме) коэффициент броуновской коагуляции частиц определяется интерполяционной формулой Фукса

$$K_{i,j}^B = \frac{4\pi(R_i + R_j)(D_{p,i} + D_{p,j})}{\frac{R_i + R_j}{R_i + R_j + (\delta_i^2 + \delta_j^2)^{1/2}} + \frac{4(D_{p,i} + D_{p,j})}{(R_i + R_j)(V_{p,i}^2 + V_{p,j}^2)^{1/2}}},$$

где δ_i — параметр, определяемый в теории Фукса (так называемый радиус сферы столкновений частиц при их тепловом движении в газе частиц) и зависящий от средней длины свободного пробега частиц $\lambda_{p,i}$:

$$\delta_i = \frac{(2R_i + \lambda_{p,i})^3 - (4R_i^2 + \lambda_{p,i}^2)^{3/2}}{6R_i \lambda_{p,i}} - 2R_i,$$

$$\lambda_{p,i} = \frac{2D_{p,i}}{\pi V_{p,i}}.$$

Интерполяционная формула Фукса удовлетворяет предельным переходам в зависимости от значения числа Кнудсена для частиц (т. е. $K_{i,j}^B \Rightarrow K_{i,j}^{B,d}$ при $\text{Kn}_{g,i} \ll 1$ и $K_{i,j}^B \Rightarrow K_{i,j}^{B,f}$ при $\text{Kn}_{g,i} \gg 1$) и экспериментальным данным в переходном режиме [12; 29].

3. Модели осаждения аэрозольных частиц

Пассивно, с потоками газа, могут распространяться только газообразные ПД и очень мелкие частицы аэрозолей (порядка 0,1 мкм и менее). Поэтому важно изучать процессы распространения, взаимопревращения и осаждения частиц в каналах реакторной установки и помещениях защитной оболочки АЭС. Практически во всех аэрозольных кодах, используемых при расчетах тяжелых аварий (в частности, CONTAIN [30; 31], MELCOR/MAEROS [32], СОКРАТ/ПРОФИТ [16]), предполагается, что различные механизмы осаждения действуют независимо друг от друга, и полная скорость осаждения частиц определяется без учета взаимного влияния отдельных механизмов осаждения. Во многих случаях это оправданно, но в целом не соответствует действительности. В данном разделе будут предложены обобщающие зависимости, учитывающие взаимное влияние различных механизмов осаждения: броуновской и турбулентной диффузии, турбофореза, термофореза и диффузиофореза, седиментации под действием силы тяжести и центробежной силы при закрутке потока или обтекании искривленной поверхности. Особое внимание уделено турбулентным механизмам осаждения вследствие практической важности и сложности этих процессов.

Скорость осаждения частиц на ограничивающую поверхность в соответствии с приближением метода суперпозиции сил представляется в виде

$$V_d = \kappa (V_{GF} + V_{CF} + V_{TP} + V_{CT} + V_{DP} + V_{DF} + V_{TB}), \quad (3.1)$$

где $\kappa \equiv J_w^\circ / J_w$ — коэффициент захвата, равный отношению потока осевших на поверхности частиц J_w° к полному потоку осаждения J_w ; скорость осаждения V_d определяется как J_w° / Φ_m , где Φ_m — средняя концентра-

ция частиц в рассматриваемой пространственной ячейке. Соотношение (3.1) выражает скорость осаждения частиц в виде суммы отдельных составляющих, обусловленных следующими механизмами: гравитационной силой V_{GF} , центробежной силой V_{CF} , термофорезом V_{TR} , конвективным переносом V_{CT} , диффузиофорезом V_{DP} , броуновской и турбулентной диффузией V_{DF} и турбофорезом V_{TB} . Все механизмы, приводящие к осаждению аэрозольных частиц, с некоторой степенью условности могут быть подразделены на два типа. К первому (конвективному) типу относятся механизмы, приводящие к появлению направленной к стенке осредненной скорости аэрозоля в результате вовлечения частиц в конвективное движение парогазовой среды (например, при конденсации пара на стенке) и действия массовых сил (гравитации, центробежной силы, термофореза, диффузиофореза и т. д.). Ко второму (флуктуационному) типу относятся диффузионный и миграционный механизмы, индуцирующие осаждение вследствие флуктуации скоростей частиц, т. е. в результате броуновского и турбулентного движения. Диффузионная и миграционная (турбофоретическая) составляющие скорости осаждения возникают вследствие неоднородностей распределений концентрации частиц и турбулентных напряжений несущей среды. Эти величины должны находиться из решения уравнений сохранения концентрации и количества движения частиц аэрозолей и в существенной степени зависят от режима течения (ламинарного или турбулентного).

Выражение (3.1) используется практически во всех известных аэрозольных кодах для расчета процесса осаждения частиц. Согласно (3.1) предполагается, что отдельные механизмы действуют независимо и полный поток осаждения определяется без учета взаимного влияния различных механизмов осаждения. Однако суперпозиция скоростей осаждения в общем случае может нарушаться. Следует также отметить, что имеет место принципиальное различие между процессами осаждения частиц при ламинарном и турбулентном режимах течения, а именно скорость осаждения частиц аэрозолей из ламинарного потока в данном сечении канала зависит от предыстории течения и, в частности, от толщины диффузионного пограничного слоя, развивающегося от входного сечения. Используемое в некоторых аэрозольных кодах априорное задание толщины диффузионного слоя является очень грубым приближением. Напротив, скорость осаждения частиц из турбулентного потока определяется главным образом характеристиками потока в рассматриваемом сечении канала и слабо зависит от предыстории течения, т. е. имеет локальный характер. Другими словами, скорость осаждения малоинерционных частиц слабо связана с картиной течения вдали от рассматриваемой поверхности осаждения. Поэтому скорость осаждения таких частиц из турбулентного потока может

быть определена локально, из анализа течения только вблизи данной поверхности независимо от картины течения на периферии.

3.1. Осаждение частиц под действием механизмов конвективного типа

В этом подразделе рассмотрим осаждение под действием механизмов, приводящих к появлению направленной к стенке осредненной скорости аэрозоля. Скорость гравитационного осаждения (седиментации) зависит главным образом от силы сопротивления движению аэрозольной частицы и определяется выражением

$$V_{GF} = (1 - A)\tau_p g \cos \varphi, \quad (3.2)$$

где g — ускорение силы тяжести; φ — угол между направлением силы тяжести и нормалью к поверхности. Величина $A \equiv (1 + C_A)\rho_f / (\rho_p + C_A\rho_f)$ характеризует эффект присоединенной массы, где ρ_p — плотность материала аэрозольных частиц; ρ_f — плотность парогазовой среды; C_A — коэффициент присоединенной массы (для сферических частиц $C_A = 0,5$). Время динамической релаксации небольшой аэрозольной частицы τ_p определяется соотношением

$$\tau_p = \frac{\tau_{p0} (1 + C_A\rho_f / \rho_p) \varphi_1(\text{Kn})}{\varphi_2(\text{Re}_p)}, \quad \tau_{p0} = \frac{\rho_p d_p^2}{18\rho_f \nu_f}, \quad (3.3)$$

где τ_{p0} — время релаксации при стоксовом обтекании частицы; d_p — диаметр частицы; ν_f — коэффициент кинематической вязкости парогазовой среды; $\text{Kn} \equiv 2l_m / d_p$ — число Кнудсена; $l_m \equiv 2\nu_f / u_i$ — длина свободного пробега молекул в парогазовой среде; u_i — средняя скорость теплового движения молекул; R — газовая постоянная парогазовой среды; T — температура парогазовой среды; $\text{Re}_p \equiv d_p W / \nu_f$ — число Рейнольдса обтекания частицы; W — относительная скорость между частицей и парогазовой средой. Зависимость $\varphi_1(\text{Kn})$, называемая поправкой Каннингема—Милликена, описывает влияние разреженности окружающей частицу среды на силу гидродинамического сопротивления и представляется в виде

$$\varphi_1(\text{Kn}) = 1 + \text{Kn} \left[A_1 + A_2 \exp\left(-\frac{A_3}{\text{Kn}}\right) \right],$$

где $A_1 = 1,257$, $A_2 = 0,40$, $A_3 = 1,10$ [33] или $A_1 = 1,20$, $A_2 = 0,41$, $A_3 = 0,88$ [34]. Зависимость $\varphi_2(\text{Re}_p)$ характеризует влияние сил инерции на гидродинамическое сопротивление частицы и может быть описана аппроксимацией Шиллера—Неймана [35]:

$$\varphi_2(\text{Re}_p) = \begin{cases} 1 + 0,15 \text{Re}_p^{0,687} & \text{при } \text{Re}_p \leq 10^3, \\ 0,11 \text{Re}_p / 6 & \text{при } \text{Re}_p > 10^3. \end{cases}$$

Для рассматриваемых аэрозолей ($d_p \leq 20$ мкм) поправку $\varphi_2(\text{Re}_p)$ можно не учитывать (в отличие от поправки $\varphi_1(\text{Kn})$).

Скорость осаждения, индуцированная центробежной силой при обтекании криволинейной поверхности или в закрученном потоке, может быть определена по формуле

$$V_{\text{CF}} = \frac{(1-A)\tau_p U_{\text{xw}}^2}{R_w}, \quad (3.4)$$

где U_{xw} — эффективная скорость движения потока вблизи поверхности осаждения; R_w — радиус кривизны поверхности осаждения.

Скорость осаждения в результате термофореза определяется в виде [36]

$$V_{\text{TM}} = \frac{36(1-A)\beta_{\text{TM}}\tau_p\mu_f^2}{\rho_f\rho_p d_p^2 T} \left(\frac{\partial T}{\partial y} \right)_0, \\ \beta_{\text{TM}} = \frac{C_1(\lambda_f/\lambda_p + C_3\text{Kn})}{(1+3C_2\text{Kn})(1+2\lambda_f/\lambda_p + 2C_3\text{Kn})}, \quad (3.5)$$

где μ_f — коэффициент динамической вязкости парогазовой среды; T — температура потока у стенки; $(\partial T / \partial y)_0$ — градиент температуры у стенки; λ_p и λ_f — коэффициенты теплопроводности материала частиц и парогазовой среды. Константы согласно [34] имеют следующие значения: $C_1 = 1,17$, $C_2 = 1,14$, $C_3 = 2,18$.

Конвективный механизм осаждения связан со стефановским потоком вследствие конденсации пара. Скорость конвективного переноса частиц на стенке V_{CT} может быть принята равной нормальной компоненте скорости парогазовой смеси вследствие конденсации пара U_{yw} . Механизм осаждения, называемый диффузиофорезом, обусловлен диффузией молекул в парогазовой среде и может иметь место даже при отсутствии конвективного переноса со средней скоростью парогазовой среды. Последний механизм, как правило, оказывается несущественным по сравнению с другими механизмами осаждения.

3.2. Осаждение за счет броуновской диффузии при ламинарном течении

Скорость осаждения частиц в результате броуновской диффузии при движении парогазовой смеси в круглом или плоском канале определяется выражением

$$V_{DF} = \frac{D_B}{r_w} \max \left[\frac{3^{2/3} f''(0) \left(\frac{U_m r_w^2}{x v_f} \right)^{1/2}}{2^{1/3} \Gamma(1/3)} , \frac{1}{\Gamma(1/3) \left(\frac{3(3+5i) U_m r_w^2}{2^i x D_B} \right)^{1/3}} - \left(\frac{i}{2} + 0,1 \right) \right], \quad (3.6)$$

$$D_B = \frac{k_B T \phi_1(\text{Kn})}{3\pi\mu_f d_p},$$

где x — расстояние от входного сечения; r_w — радиус круглой трубы или полуширина плоской щели; U_m — среднемассовая скорость движения парогазовой среды в канале; $i=0$ для плоского канала и $i=1$ для круглого канала; $\Gamma(1/3)$ — гамма-функция, равная 2,679; $f''(0)$ — безразмерный градиент скорости на стенке в ламинарном пограничном слое, равный 0,332; D_B — коэффициент броуновской диффузии частиц; k_B — постоянная Больцмана. Первый член в квадратных скобках в (3.6) характеризует осаждение в начальном участке канала с однородным профилем скорости во входном сечении, когда справедливо решение Блазиуса для ламинарного пограничного слоя на пластине. Второй член в квадратных скобках соответствует асимптотическому решению для диффузии при больших числах Шмидта в гидродинамически развитом ламинарном течении в трубе с параболическим профилем скорости [37].

3.3. Осаждение за счет диффузии и турбофореза при турбулентном течении

Изучению осаждения частиц и капель из турбулентного потока на ограничивающие поверхности в силу практического значения этой задачи посвящено большое количество экспериментальных и численных работ. Анализ и обобщение результатов экспериментальных исследований в вертикальных и горизонтальных трубах и каналах содержится в [38—40]. Авторы [40—45] построили лагранжевы модели осаждения, рассматривая взаимодействие частиц с двумерными вихрями, имитирующими пристеночные организованные (когерентные) структуры. В [46] для расчета осаждения применен стохастический лагранжев подход, основанный на взаимодействии частиц со случайными турбулентными вихрями с гауссовым распределением скоростей. Численному исследованию осаждения частиц в плоском вертикальном канале на основе траекторного моделирования в сочетании с методами прямого численного моделирования (Direct Numerical Simulation — DNS) и крупных вихрей (LES) посвящены соответственно работы [47—53] и [54; 55]. Авторы [56—59] построили эйлеровы модели турбулентного осаждения, основанные на локально-равновесных соотношениях между интенсивностями нормальных компонент пульсаций скоростей дисперсной и сплошной фаз. Однако модели, основанные на локально-равновесных соотношениях для турбулентных напряжений, справедливы только для малоинерционных частиц и неприменимы для частиц, время релаксации которых сопоставимо с интегральным масштабом турбулентности сплошной среды. Авторы [60] уточнили локально-равновесные модели, учитывая «эффект памяти» при помощи алгебраических соотношений. Нелокальные транспортные модели турбулентного осаждения на основе дифференциальных уравнений для вторых моментов пульсаций скорости частиц были предложены в [58; 59; 61]. Влияние термофореза на осаждение частиц из турбулентного потока численно исследовалось, например, в [62].

Интенсивность осаждения частиц из турбулентного потока принято характеризовать зависимостью коэффициента осаждения $j_+ \equiv J_w / \Phi_m u_*$ от безразмерного времени релаксации $\tau_+ \equiv \tau_p u_*^2 / \nu_f$, где $u_* \equiv (\bar{\sigma}_w / \rho_f)^{1/2}$ — динамическая скорость; $\bar{\sigma}_w$ — осредненное касательное напряжение. В соответствии с доминирующим механизмом осаждения, определяющим зависимость j_+ от τ_+ , весь диапазон изменения инерционности частиц может быть условно подразделен на три характерные области: малоинерционные, среднеинерционные и высокоинерционные частицы.

Процесс осаждения малоинерционных частиц ($\tau_+ < 1$) управляется главным образом броуновской и турбулентной диффузией. Кроме того, существенную роль могут играть некоторые силы, определяющие перенос субмикронных частиц (например, сила термофореза в неизотермическом течении), а также конвективный перенос, обусловленный стефановским потоком в случае конденсации пара. При определяющей роли диффузионного механизма j_+ монотонно снижается с ростом τ_+ , что связано с уменьшением значения коэффициента броуновской диффузии при увеличении размера частиц.

Основным механизмом осаждения среднеинерционных частиц ($1 \leq \tau_+ \leq 100$) является их турбулентная миграция (турбофорез) из ядра течения с высоким уровнем турбулентных пульсаций скорости в зону вязкого подслоя у стенки. Для этой области инерционности частиц характерна резкая растущая зависимость j_+ от τ_+ . Авторы [46; 47] впервые численным путем установили тенденцию осаждающихся частиц накапливаться под действием турбофореза в области вязкого подслоя, и этот эффект аккумуляции частиц впоследствии был воспроизведен во многих работах.

Высокоинерционные частицы ($\tau_+ > 100$) слабо вовлекаются в турбулентное движение несущей жидкости, что приводит к уменьшению коэффициента осаждения j_+ в вертикальном канале с ростом τ_+ . Однако интенсивность осаждения высокоинерционных частиц определяется не только характеристиками пристеночной турбулентности, но в существенной степени зависит от внешних параметров течения, в частности, от числа Рейнольдса, построенного по гидравлическому диаметру канала. Кроме того, значительное влияние на осаждение высокоинерционных частиц в вертикальном канале может оказывать сила тяжести, действие которой проявляется главным образом через «эффект пересечения траекторий».

Аэрозоли с размерами, не превышающими 20 мкм, при условиях, характерных для приложений к течениям в реакторе АЭС, в соответствии с принятой классификацией представляют собой малоинерционные или среднеинерционные частицы. Поэтому в данном подразделе ограничимся рассмотрением диффузионного и турбофорезного режимов осаждения, характерных для малоинерционных и среднеинерционных частиц.

Осаждение малоинерционных частиц ($\tau_+ < 1$) при незначительной роли конвективного переноса, термофореза и других сил, характерных для субмикронных аэрозолей, определяется процессами броуновской и турбулентной диффузии. Благодаря турбулентности диффузионное осаждение определяется характеристиками потока в рассматриваемом сечении канала и не зависит от его предыстории, т. е. является локальным процессом.

Вследствие этого распределение частиц вблизи поверхности осаждения может быть определено из уравнения диффузии, учитывающего изменение концентрации только в поперечном к стенке направлении y :

$$\frac{d}{dy} \left[(D_B + D_T) \frac{d\Phi}{dy} \right] = 0, \quad (3.7)$$

где Φ — концентрация частиц.

Коэффициент турбулентной диффузии в области вязкого подслоя определяется соотношением

$$\frac{D_T}{\nu_f} = \alpha_n y_+^n, \quad (3.8)$$

где $y_+ = y u_* / \nu_f$ — расстояние от стенки в универсальных переменных; α_n — постоянная. Показатель степени в (3.8) может быть равен 3 или 4.

Решение уравнения (3.7) с учетом (3.8) имеет вид

$$\Phi = \Phi_w + \frac{J_w}{u_*} \int_0^{y_+} \frac{dy_+}{Sc_B^{-1} + \alpha_n y_+^n}, \quad (3.9)$$

где $J_w \equiv D_B (d\Phi / dy)_0$; $Sc_B \equiv \nu_f / D_B$ — число Шмидта для броуновской диффузии.

Из (3.9) с учетом граничных условий $C(0) = 0$ и $C(\infty) = C_m$ определяется коэффициент осаждения

$$j_+ = \beta_n Sc_B^{(1-n)/n}, \quad \beta_n = \frac{n \alpha_n^{1/n}}{\pi} \sin \frac{\pi}{n}. \quad (3.10)$$

Из (3.9) наглядно видно, что локальное выражение для коэффициента осаждения, т. е. не зависящее от предыстории течения, не может быть получено для ламинарного режима ($D_T = 0$), поскольку интеграл не сходится при $y \rightarrow \infty$. Коэффициент α_n в (3.8) при $n = 4$ может быть выражен через постоянную Прандтля—Кармана κ , постоянную Ван-Дриста A_D и турбулентное число Шмидта Sc_T [58]:

$$\alpha_4 = \frac{\kappa^2}{A_D^2 Sc_T}. \quad (3.11)$$

При подстановке обычно используемых значений $\kappa = 0,4$, $A_D = 26$ и $Sc_T = 0,9$ получается $\alpha_4 = 2,63 \cdot 10^{-4}$, что неплохо согласуется со значением $\alpha_4 = 3 \cdot 10^{-4}$, полученным в экспериментах [63]. Таким образом, коэффициент осаждения аэрозолей в диффузионном режиме (3.10) определяется выражением

$$j_+ = 0,115 Sc_B^{-3/4}. \quad (3.12)$$

В отличие от диффузионного режима при преобладающей роли турбофорезного механизма не может быть получено простое аналитическое решение для определения коэффициента осаждения. Известные в литературе аналитические решения являются полуэмпирическими и в существенной степени опираются на экспериментальные данные. При этом нужно иметь в виду, что вследствие резкого роста коэффициента осаждения j_+ от параметра инерционности τ_+ в этой области имеет место очень сильная чувствительность зависимости $j_+(\tau_+)$ к полидисперсности ансамбля частиц. Поэтому к зависимостям $j_+(\tau_+)$, полученным на основе обобщения экспериментальных данных или полуэмпирических моделей, следует относиться с большой осторожностью. Более надежными представляются обобщающие зависимости, полученные с использованием результатов прямых численных расчетов и теоретических моделей, основанных на уравнениях для функции плотности вероятности (ФПВ) распределения скорости или вторых моментов пульсаций скорости частиц. Так, в [58] для турбофорезного режима осаждения предложена зависимость

$$j_+ = \frac{2 \cdot 10^{-4} \tau_+^{2,5}}{1 + 10^{-3} \tau_+^{2,5}}. \quad (3.13)$$

На рис. 13 показано сравнение формулы (3.13) с экспериментальными данными [64] для опускного течения в трубе, а также с прямыми численными расчетами для плоского канала [47; 55] и для круглой трубы [65]. Там же представлены эмпирические корреляции [38], полученные в результате обобщения практически всех известных к тому времени экспериментальных данных:

$$j_+ = \begin{cases} 3,25 \cdot 10^{-4} \tau_+^2 & \text{при } \tau_+ < 22,9, \\ 0,17 & \text{при } \tau_+ > 22,9. \end{cases} \quad (3.14)$$

Видно, что для среднеинерционных аэрозолей турбофорез является причиной резкого возрастания коэффициента осаждения частиц с увеличени-

ем их инерционности. Как уже указывалось, высокоинерционные частицы ($\tau_+ > 100$) слабо вовлекаются в турбулентное движение несущей жидкости, что и приводит к выполаживанию зависимости j_+ от τ_+ .

Зависимость, объединяющая формулы (3.13) и (3.14) для диффузионного и турбофорезного режимов, имеет вид [58]

$$j_+ = \frac{0,115 Sc_B^{-3/4} + 2 \cdot 10^{-4} \tau_+^{2,5}}{1 + 10^{-3} \tau_+^{2,5}}. \quad (3.15)$$

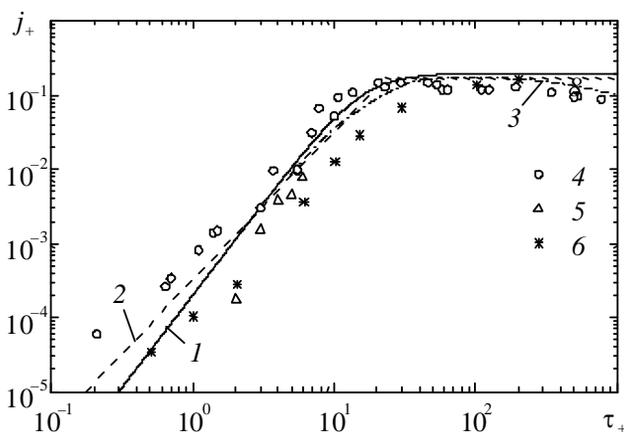


Рис. 13. Зависимость коэффициента осаждения от инерционности частиц для турбофорезного режима:
1 — формула (3.13), 2 — эмпирические корреляции (3.14), 3 — DNS [65],
4 — эксперимент [64], 5 — DNS [47], 6 — DNS [55]

На рис. 14 показано сравнение результатов расчета коэффициента осаждения при разных значениях числа Рейнольдса и параметра броуновской диффузии $B = Sc_B / \tau_+^{1/2}$, а также экспериментальных данных для вертикальных труб, собранных в [38], с обобщающей зависимостью (3.15). Видно, что формула (3.15) согласуется с экспериментальными и расчетными данными во всем рассматриваемом диапазоне изменения параметра инерционности частиц. Первоначальное снижение скорости осаждения с ростом τ_+ происходит благодаря уменьшению коэффициента броуновской диффузии. Последующий рост скорости осаждения с увеличением τ_+ , как уже указывалось, объясняется турбулентной миграцией. Влияние броуновской диффузии при $\tau_+ > 1$ очень мало, поэтому параметр B , характе-

ризирующий эффект броуновской диффузии, может быть исключен из списка определяющих параметров. Таким образом, осаждение аэрозольных частиц определяется их турбулентной диффузией и миграцией в неоднородных полях концентрации и пульсаций скорости.

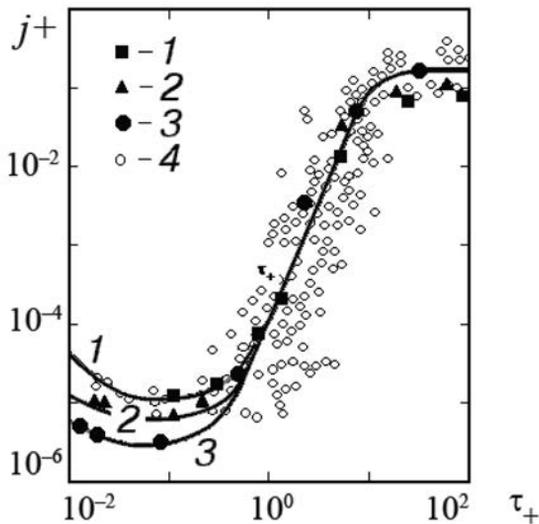


Рис. 14. Зависимость коэффициента осаждения от инерционности частиц для диффузионно-турбофорезного режима:
1 — $Re = 1,5 \cdot 10^5, B = 5 \cdot 10^5$; 2 — $Re = 6 \cdot 10^4, B = 1,2 \cdot 10^6$; 3 — $Re = 1,5 \cdot 10^4, B = 4,2 \cdot 10^6$; 4 — экспериментальные данные [38]

3.4. Осаждение частиц при совместном действии механизмов конвективного и флуктуационного типов

Вначале рассмотрим осаждение аэрозольных частиц из ламинарного потока в результате совместного действия механизмов обоих типов. В [56; 57] анализировалось влияние термофореза на осаждение броуновских частиц при ламинарном гидродинамически развитом течении в каналах. Полученное в этой работе решение можно считать справедливым при наличии «конвективной составляющей» скорости на стенке V_C , обусловленной стефановским потоком, силой тяжести и другими силами, а не только термофорезом. В этом случае скорость осаждения выражается зависимостью

$$V_d = \frac{\kappa V_C}{1 - \exp(-V_C/V_{DF})}, \quad (3.16)$$

где $V_C \equiv V_{GF} + V_{CF} + V_{TP} + V_{CT} + V_{DP}$, а диффузионная составляющая скорости осаждения V_{DF} определяется согласно (3.6). Формула (3.16) совпадает с зависимостью, описывающей влияние поперечного потока массы на относительный закон теплопереноса в рамках «пленочной теории» [66; 67]. Отметим, что при наличии скорости V_C , индуцированной силой тяжести в наклонной трубе или другим фактором, нарушающим осесимметричность осаждения, необходимо выполнить осреднение (3.16) по периметру трубы.

Покажем, что зависимость (3.16) будет справедлива и для диффузионного осаждения при турбулентном режиме течения. В этом случае уравнение диффузии с учетом переноса аэрозолей благодаря «конвективной» составляющей скорости V_C записывается в виде

$$\frac{d}{dy} \left[(D_B + D_T) \frac{d\Phi}{dy} \right] + V_C \frac{d\Phi}{dy} = 0.$$

Решение этого уравнения с учетом (3.8) имеет вид

$$\Phi = \Phi_w + \frac{J_w}{V_C} \left[1 - \exp \left(-V_+ \int_0^{y_+} \frac{dy_+}{Sc_B^{-1} + \alpha_n y_+^n} \right) \right], \quad V_+ = \frac{V_C}{u_*}. \quad (3.17)$$

Из (3.17) с учетом граничных условий $C(0) = 0$ и $C(\infty) = C_m$ находится коэффициент осаждения

$$j_+ = \frac{V_+}{1 - \exp(-V_+/j_{+0})}, \quad (3.18)$$

где j_{+0} — коэффициент осаждения в диффузионном режиме, определяющийся соотношением (3.12). Очевидно, что зависимость (3.18) аналогична (3.16). Зависимость (3.18) может быть распространена на диффузионно-турбофорезный режим осаждения, если вместо (3.12) для определения j_{+0} использовать корреляцию (3.15).

Зависимость (3.18) протестирована путем сравнения с экспериментальными данными [68] для неизотермического течения в круглой охлаждаемой трубе, когда существенно влияние силы термофореза. В этом случае скорость V_C

оказывается равной скорости термофореза V_{TM} . В экспериментах [68] диаметр трубы r_w равнялся 7,92 мм, охлаждаемая водой длина трубы L составляла 305 мм. Температура стенки трубы T_w держалась на уровне 300 К, в то время как входная температура газа T_0 равнялась соответственно 505, 630 и 755 К. Входная среднемассовая скорость U_m равнялась 60 м/с. Аэрозоль представлял собой субмикронные частицы из NaCl. В экспериментах измерялись массовые потоки аэрозоля во входном и выходном сечениях охлаждаемой трубы. Эффективность осаждения рассчитывалась по формуле

$$\xi = 1 - \frac{J_L}{J_0} = 1 - \exp\left(-\int_0^L \frac{2\kappa j_+ u_s dx}{U_m r_w}\right), \quad (3.19)$$

где J_L и J_0 — массовые расходы аэрозоля в выходном и входном сечениях трубы.

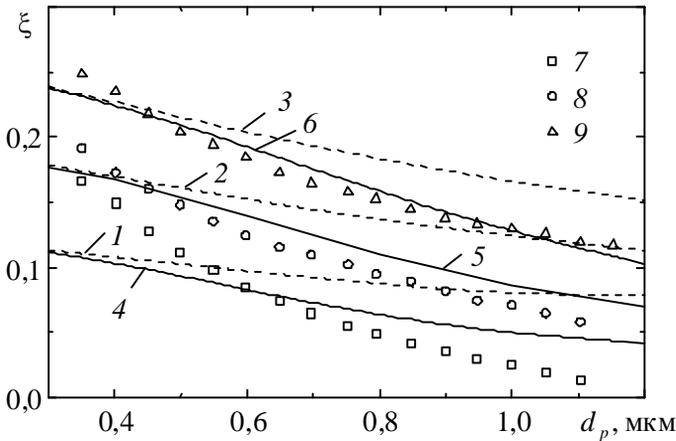


Рис. 15. Зависимость эффективности осаждения от диаметра частиц:
 1—3 — расчет без учета уноса; 4—6 — расчет с учетом уноса;
 7—9 — эксперимент [68]; 1, 4, 7 — для $T_0 = 505$ К; 2, 5, 8 — для $T_0 = 630$ К;
 3, 6, 9 — для $T_0 = 755$ К

На рис. 15 показана зависимость эффективности осаждения от размера аэрозолей для разных значений входной температуры потока. Очевидно, что с увеличением T_0 при фиксированном значении T_w эффект термофореза возрастает, что и приводит к увеличению эффективности осаждения. Влияние уноса усиливается по мере увеличения размера частиц. Значения

ξ , предсказываемые без учета явления уноса (т. е. при $k = 1$), для относительно крупных частиц оказываются существенно ниже экспериментальных данных. Анализ, выполненный в [69; 70], также указывает на существенное влияние эффекта уноса на ξ . Результаты расчета эффективности осаждения, полученные с учетом явления уноса частиц, значительно лучше соответствуют экспериментальным данным.

4. Коагуляция аэрозольных частиц

При расчете процесса агломерации частиц в большинстве известных аэрозольных кодов предполагается, что различные механизмы коагуляции действуют независимо друг от друга. Соответственно полное ядро коагуляции считается равным сумме ядер коагуляции, обусловленных отдельными механизмами столкновений. В действительности все механизмы столкновений взаимосвязаны, и линейная суперпозиция ядер коагуляции в ряде случаев может приводить к заметным ошибкам. Кроме того, никогда не принимается во внимание эффект аккумулярования (кластеризации) частиц под действием турбулентности, который способен привести к существенному возрастанию скорости агломерации. В настоящей работе ставится задача построить обобщающие корреляции, описывающие вклад наиболее существенных механизмов коагуляции в процесс агломерации частиц аэрозолей с учетом взаимодействия этих механизмов.

Цель работы состоит в описании физических моделей и получении на их основе корреляционных зависимостей для ядра коагуляции частиц аэрозолей. Плотность аэрозольных частиц предполагается много большей плотности окружающей среды, а их размер — не более 20 мкм. Особое внимание уделено турбулентному механизму коагуляции вследствие практической важности и сложности этого процесса.

4.1. Ядра столкновений и коагуляции

Термины «ядро столкновений» и «ядро коагуляции» возникли вследствие того, что эти величины могут входить в подынтегральные выражения кинетического уравнения, описывающего изменение спектра частиц по размерам в результате процессов агломерации. В дальнейшем, как и в [71], эти термины будем относить к процессам, характеризваемым соответственно отсутствием и наличием слияния частиц при соударениях, т. е. сохранением или уменьшением числа частиц в системе. Кроме того, ядро коагуляции должно учитывать гидродинамическое взаимодействие двух частиц, обусловленное их относительным движением. Таким образом, ядро коагуляции

(агломерации), характеризующее процесс слияния частиц при столкновениях, может отличаться от ядра столкновений, учитывающего только в кинематическом приближении (без учета гидродинамического взаимодействия) процесс столкновений без анализа вероятности их слияния.

Если не учитывать гидродинамическое взаимодействие частиц в рамках статистической сферической формулировки, ядро столкновений незаряженных частиц сорта 1 с частицами сорта 2 определяется кинематическим соотношением [72; 73]

$$\beta^{\text{col}} = -4\pi R^2 \langle w_r^-(R) \rangle q \Gamma_{12}(R), \quad (4.1)$$

где r — расстояние между центрами двух частиц; $R \equiv r_1 + r_2$ — эффективный радиус столкновений; r_α — радиус частиц сорта α ($\alpha = 1, 2$); $w_r \equiv W_r + w'_r$ — радиальная компонента относительной скорости двух частиц, равная сумме осредненной W_r и пульсационной w'_r составляющих; $\langle w_r^-(R) \rangle$ — средняя относительная радиальная скорость, направленная внутрь сферы радиуса $r = R$ (т. е. $w_r < 0$); q — вероятность реализации события $w_r < 0$; $\Gamma_{12}(R)$ — радиальная функция распределения при $r = R$. Функция $\Gamma_{12}(R)$ описывает эффект аккумуляции частиц и равняется отношению вероятности обнаружения частиц сорта 2 в бесконечно тонкой оболочке радиуса r вокруг выделенной частицы сорта 1 к соответствующей величине в однородно распределенной в пространстве системе частиц.

Как и при анализе осаждения, все механизмы, приводящие к столкновениям и коагуляции частиц, с некоторой степенью условности могут быть подразделены на два типа. К первому относятся механизмы, вызывающие столкновения вследствие флуктуаций скоростей частиц, т. е. в результате броуновского или турбулентного движения. Ко второму типу относятся механизмы, приводящие к появлению осредненной относительной скорости между двумя частицами, например, в результате градиента скорости несущего потока или гравитационной седиментации частиц разного сорта, т. е. с разными временами релаксации $\tau_{r\alpha}$.

Вначале рассмотрим флуктуационный механизм столкновений. ФПВ пульсационной составляющей радиальной относительной скорости задается гауссовым распределением

$$P(w_r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \langle w_r'^2 \rangle}} \exp\left(-\frac{w_r'^2}{2\langle w_r'^2 \rangle}\right). \quad (4.2)$$

Если не происходит слияния частиц при столкновениях, осредненная составляющая радиальной относительной скорости частиц равна нулю ($\langle W_r \rangle = 0$). В этом случае согласно (4.2) средняя по модулю и среднеквадратичная радиальные относительные скорости связаны соотношением

$$\langle |w_r| \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} |w_r| P(w_r) dw_r = \left(\frac{2}{\pi} \langle w_r'^2 \rangle \right)^{1/2}. \quad (4.3)$$

Кроме того, в соответствии с (4.2)

$$\langle w_r^- \rangle = -\langle |w_r| \rangle, \quad q = 1/2. \quad (4.4)$$

С учетом (4.3) и (4.4) ядро столкновений (4.1) представляется в виде

$$\beta^{\text{col}} = \left[8\pi \langle w_r'^2(R) \rangle \right]^{1/2} R^2 \Gamma_{12}(R). \quad (4.5)$$

Ядро коагуляции определяется выражением

$$\beta^{\text{coag}} = -4\pi R^2 W_r(R) \Gamma_{12}(R), \quad (4.6)$$

где осредненная радиальная скорость частиц на поверхности контакта $r = R$ находится из соотношения

$$W_r(R) = \phi \langle w_r^- \rangle q, \quad (4.7)$$

где ϕ — коэффициент захвата при столкновении (эффективность коагуляции), характеризующий вероятность слияния сталкивающихся частиц, а также эффект гидродинамического взаимодействия частиц. Если по-прежнему считать, что ФПВ относительной радиальной скорости сталкивающихся частиц описывается гауссовым распределением, то остаются в силе соотношения (4.4), и выражение (4.7) примет вид

$$W_r(R) = -\phi \left(\frac{\langle w_r'^2(R) \rangle}{2\pi} \right)^{1/2}. \quad (4.8)$$

Подстановка (4.8) в (4.6) определяет ядро коагуляции в виде

$$\beta^{\text{coag}} = \phi \left(8\pi \langle w_r'^2(R) \rangle \right)^{1/2} R^2 \Gamma_{12}(R). \quad (4.9)$$

Равновесное гауссово распределение (4.2) и основанные на нем соотношения (4.4) и (4.8) нарушаются при наличии коагуляции, если даже при отсутствии коагуляции (т. е. при $\phi = 0$) они выполнялись строго. Однако вносимая этими допущениями погрешность в определение ядра коагуля-

ции (4.9) может быть компенсирована путем коррекции коэффициента захвата ϕ . Следует также отметить, что ядро коагуляции может отличаться от ядра столкновений и в случае, когда коэффициент захвата ϕ равен единице (хотя в литературе данное обстоятельство, как правило, игнорируется). Этот факт связан с тем, что если даже среднеквадратичные скорости $\langle w_r^2(R) \rangle$ при отсутствии и наличии коагуляции совпадают, то радиальные функции распределения $\Gamma_{12}(R)$ в этих случаях могут существенно различаться. При коагуляции (в отличие от столкновений, не сопровождающихся слиянием частиц) происходит снижение плотности распределения «осаждающихся» частиц в окрестности выделенной частицы. В результате Γ_{12} на поверхности контакта $r = R$ имеет меньшее значение по сравнению со случаем отсутствия коагуляции. Поэтому ядро коагуляции не может превышать значения ядра столкновений, и, следовательно, β^{col} может служить в качестве верхней оценки для β^{coag} . Это различие между β^{coag} при $\phi = 1$ и β^{col} в зависимости от природы физического явления, вызывающего процесс столкновений или коагуляции, может быть значительным, а может не иметь существенного значения. Критерием возможного различия между β^{coag} при $\phi = 1$ и β^{col} может быть отношение между эффективной длиной свободного пробега частиц l_p и радиусом сферы столкновений R , т. е. число Кнудсена для частиц $\text{Kn}_p \equiv l_p / R$. Если $\text{Kn}_p \gg 1$, то разница между β^{coag} при $\phi = 1$ и β^{col} незначительна, если же $\text{Kn}_p \leq 1$, то эта разница может быть значительной.

Перейдем к определению ядра столкновений в результате совместных эффектов флуктуаций скорости и осредненной относительной скорости между частицами. Считая соотношения (4.4) по-прежнему справедливыми, в рамках сферической формулировки (4.1) можно записать

$$\beta^{\text{col}} = 2\pi R^2 \langle |w_r(R)| \rangle \Gamma_{12}(R). \quad (4.10)$$

Однако теперь для вычисления $\langle |w_r| \rangle$ необходимо выполнить осреднение по случайному распределению w_r и телесному углу, характеризующему пространственную ориентацию вектора скорости w относительно соединяющего центры сталкивающихся частиц вектора

$$\langle |w_r| \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \int_{-\infty}^{\infty} |w_r| P(w_r) \sin \varphi d\psi d\varphi dw_r, \quad (4.11)$$

где φ — полярный угол между вектором \mathbf{r} и осью \mathbf{z} , направленной для определенности вертикально вверх; ψ — азимутальный угол в перпендикулярной к \mathbf{z} плоскости (\mathbf{x}, \mathbf{y}). Выполним интегрирование в (4.11) по w_r с учетом гауссова распределения для пульсационной составляющей радиальной компоненты относительной скорости (4.2):

$$\langle |w_r| \rangle = \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \int_0^\pi \left[\left(\frac{2\langle w_r'^2 \rangle}{\pi} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{W_r^2}{2\langle w_r'^2 \rangle}\right) + W_r \operatorname{erf}\left(\frac{W_r}{(2\langle w_r'^2 \rangle)^{1/2}}\right) \right] \sin\varphi d\psi d\varphi. \quad (4.12)$$

При отсутствии осредненной относительной скорости (т. е. $W_r = 0$) выражение (4.12) переходит в (4.3). Ядро коагуляции при наличии двух типов механизмов столкновений определяется соотношением

$$\beta^{\text{coag}} = 2\pi\phi R^2 \langle |w_r(R)| \rangle \Gamma_{12}(R), \quad (4.13)$$

где $\langle |w_r| \rangle$ описывается выражением (4.12).

4.2. Турбулентно-броуновское ядро коагуляции

Вначале рассмотрим коагуляцию малоинерционных аэрозольных частиц под действием турбулентности и броуновской диффузии при выполнении условий $\bar{R} \leq 0,1$ и $St_\alpha \leq 0,6$, где $\bar{R} \equiv R/\eta$ — безразмерный радиус столкновений; $St_\alpha \equiv \tau_{p\alpha}/\tau_k$ — число Стокса для частиц группы α ; $\eta \equiv (v_f^3/\varepsilon)^{1/4}$; $\tau_k \equiv (v_f/\varepsilon)^{1/2}$ — колмогоровские пространственный и временной микромасштабы; v_f — коэффициент кинематической вязкости окружающей сплошной среды; ε — скорость диссипации турбулентной энергии.

В изотропной турбулентности радиальная функция распределения подчиняется уравнению неразрывности в пространстве относительного движения двух частиц [74; 75]

$$\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial t} + \frac{\partial W_k \Gamma_{12}}{\partial r_k} = 0, \quad (4.14)$$

где осредненная относительная скорость W_i представляется в виде суммы диффузионной и миграционной составляющих:

$$W_i = W_i^{\text{diff}} + W_i^{\text{migr}}. \quad (4.15)$$

Диффузионная относительная скорость имеет вид

$$W_i^{\text{diff}} = -D_{p\ ik}^r \frac{\partial \ln \Gamma_{12}}{\partial r_k}. \quad (4.16)$$

Тензор относительной диффузии частиц представляется как сумма трех процессов, обусловленных соответственно относительным турбулентным движением двух частиц в монодисперсном приближении, относительным турбулентным ускорением двух частиц с разными временами релаксации и броуновским движением:

$$D_{p\ ij}^r = D_{p\ ij}^{r*} + D_{a\ ij}^r + D_{b\ ij}^r. \quad (4.17)$$

Тензор относительной турбулентной диффузии двух частиц в монодисперсном приближении выражается следующим образом [76]:

$$D_{p\ ij}^{r*} = \tau_p \left(S_{p\ ij}^* + g_\sigma \Sigma_{ij} + g_\omega \Omega_{ij} \right), \quad (4.18)$$

где $S_{p\ ij}^*(\mathbf{r})$ — структурная функция, зависящая от \mathbf{r} и характеризующая в монодисперсном приближении разность турбулентных пульсаций скоростей частиц в двух точках, разделенных расстоянием \mathbf{r} ; $\Sigma_{ij}(\mathbf{r})$ и $\Omega_{ij}(\mathbf{r})$ — эйлеровы двухточечные корреляции пульсаций скоростей деформации и вращения; g_σ и g_ω — коэффициенты, характеризующие вовлечение частиц в турбулентное движение. Величина τ_p в (4.18) представляет собой эффективное время релаксации пары частиц:

$$\tau_p = \frac{2\tau_{p1}\tau_{p2}}{\tau_{p1} + \tau_{p2}}.$$

Вклад турбулентного ускорения частиц, имеющих разное время релаксации, в коэффициент относительной диффузии определяется как [75]

$$D_{a\ ij}^r = D_a^r \delta_{ij}, \quad D_a^r = u_k^2 a_0 T_a (St_2 - St_1)^2, \quad (4.19)$$

где $u_k \equiv (v_f \varepsilon)^{1/4}$ — колмогоровский масштаб скорости; a_0 — безразмерная амплитуда флуктуаций ускорения в изотропной турбулентности; T_a —

временной масштаб затухания флуктуаций ускорения; δ_{ij} — символ Кронекера.

Тензор относительной броуновской диффузии

$$D_{bij}^r = D_B^r \delta_{ij}, \quad D_B^r \equiv k_B T \left(\frac{\tau_{p1}}{m_{p1}} + \frac{\tau_{p2}}{m_{p2}} \right), \quad (4.20)$$

где D_B^r — коэффициент относительной броуновской диффузии; k_B — постоянная Больцмана; T — температура окружающей среды; $m_{p\alpha}$ — масса частицы группы α .

Полная структурная функция пульсаций скоростей частиц $S_{p\ ij} \equiv \langle w_i' w_j' \rangle$ аналогично тензору диффузии (4.18) представляется в виде суммы трех составляющих, описывающих относительное турбулентное движение двух частиц в монодисперсном приближении, относительное турбулентное ускорение двух частиц с разными временами релаксации и броуновское движение:

$$S_{p\ ij} = S_{p\ ij}^* + S_{a\ ij} + S_{b\ ij}. \quad (4.21)$$

В изотропной турбулентности

$$S_{p\ ij}^*(\mathbf{r}) = S_{p\ nm}^*(r) \delta_{ij} + \left[S_{p\ ll}^*(r) - S_{p\ nm}^*(r) \right] \frac{r_i r_j}{r^2}, \quad (4.22)$$

где $S_{p\ ll}^*$ и $S_{p\ nm}^*$ — продольная и поперечная по отношению к вектору \mathbf{r} компоненты тензора $S_{p\ ij}^*$.

Вклад в полную структурную функцию ускорения частиц с разным временем релаксации в соответствии с (4.19) определяется выражением

$$S_{a\ ij} = S_a \delta_{ij}, \quad S_a = u_k^2 a_0 (St_2 - St_1)^2. \quad (4.23)$$

Структурная функция, связанная с броуновским движением,

$$S_{b\ ij} = \frac{k_B T \delta_{ij}}{m_{12}}, \quad m_{12} = \frac{m_{p1} m_{p2}}{m_{p1} + m_{p2}}. \quad (4.24)$$

Миграционная относительная скорость, обусловленная турбулентностью, имеет вид [74; 75]

$$W_i^{\text{migr}} = -\tau_p \frac{\partial S_p^{*ik}}{\partial r_k}. \quad (4.25)$$

С учетом сферической симметрии, имеющей место в изотропной турбулентности, и соотношений (4.15)—(4.25) уравнение для радиальной функции распределения (4.14) примет вид

$$\frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial t} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left\{ r^2 \left[D_{p||}^r \frac{\partial \Gamma_{12}}{\partial r} + \tau_p \left(\frac{2(S_{p||}^* - S_{pnm}^*)}{r} + \frac{\partial S_{p||}^*}{\partial r} \right) \Gamma_{12} \right] \right\}, \quad (4.26)$$

$$D_{p||}^r = \tau_p (S_{p||}^* + g_\sigma \Sigma_{||}) + D_a^r + D_B^r. \quad (4.27)$$

Для малоинерционных частиц в окрестности точки $r=0$ продольная и поперечная структурные функции могут быть представлены в виде [74]

$$S_{p||}^* = \frac{\varepsilon r^2}{\nu_f} \left(\frac{1}{15} + \alpha_r \text{St} \right), \quad S_{pnm}^* = \frac{\varepsilon r^2}{\nu_f} \left(\frac{2}{15} + \alpha_n \text{St} \right), \quad (4.28)$$

где число Стокса $\text{St} \equiv \tau_p / \tau_k$ определяется по эффективному времени релаксации пары частиц τ_p . Входящие в коэффициент относительной диффузии (4.27) продольная компонента корреляций пульсаций скоростей деформации $\Sigma_{||}$ и коэффициент вовлечения g_σ в окрестности $r=0$ определяются соотношением

$$\Sigma_{||} = \frac{\varepsilon r^2}{15\nu_f}, \quad g_\sigma = \frac{A_\sigma^2 (A_\sigma z^2 + 2\text{St} - z^2 \text{St})}{\text{St} (A_\sigma^2 z^2 + 2A_\sigma \text{St} + 2\text{St}^2)}, \quad (4.29)$$

где $z \equiv \tau_T / T_L$ — отношение тейлорова дифференциального τ_T и лагранжева интегрального T_L временных масштабов турбулентных пульсаций скорости сплошной среды. Постоянная A_σ в соответствии с результатами прямого численного моделирования [77] равна 2,3. Безразмерная амплитуда флуктуаций ускорения и временные тейлоров и лагранжевы масштабы турбулентности определяются соотношениями [78]

$$a_0 = \frac{a_{01} + a_{0\infty} \text{Re}_\lambda}{a_{02} + \text{Re}_\lambda}, \quad a_{01} = 11, \quad a_{02} = 205, \quad a_{0\infty} = 7,$$

$$\tau_T = \left(\frac{2 \text{Re}_\lambda}{15^{1/2} a_0} \right)^{1/2} \tau_k, \quad T_L = \frac{2(\text{Re}_\lambda + C_1) \tau_k}{15^{1/2} C_{0\infty}}, \quad C_{0\infty} = 7, \quad C_1 = 32,$$

где $\text{Re}_\lambda \equiv (15u'^4 / \varepsilon \nu_f)^{1/2}$ — число Рейнольдса, построенное по тейлоровому пространственному микромасштабу; u' — среднеквадратичная интенсивность пульсаций скорости сплошной среды. Временной масштаб затухания флуктуаций ускорения в (4.19) $T_a = C_a \tau_k$, где для согласования с данными прямого численного моделирования [75] нужно принять $C_a = 3$.

Далее будем рассматривать решение уравнения (4.26) в квазистационарном приближении, пренебрегая производной от Γ_{12} по времени. Тогда первый интеграл уравнения (4.26) с учетом (4.27)—(4.29) в переменных, обезразмеренных с помощью колмогоровских микромасштабов турбулентности, примет вид

$$\left[\text{St} \left(\frac{g_\sigma + 1}{15} + \alpha_l \text{St} \right) \bar{r}^2 + \bar{D}_a^r + \bar{D}_B^r \right] \frac{d\Gamma_{12}}{d\bar{r}} + 2\text{St}^2 (2\alpha_l - \alpha_n) \bar{r} \Gamma_{12} = \frac{C}{\bar{r}^2}, \quad (4.30)$$

$$\bar{r} = \frac{r}{\eta}, \quad \bar{D}_a^r = a_0 C_a (\text{St}_2 - \text{St}_1)^2, \quad \bar{D}_B^r = \frac{D_B^r}{\eta u_k},$$

где C — постоянная интегрирования.

При отсутствии коагуляции частиц $C = 0$ и уравнение (4.30) выражает баланс диффузионной и миграционной сил в направлении, соединяющем центры двух частиц. Диффузионная сила стремится уменьшить неравномерность в распределении частиц, а миграционная сила вызывает притяжение частиц друг к другу вследствие их взаимодействия с турбулентными вихрями. В результате интегрирования (4.30) получаем

$$\Gamma_{12}(\bar{r}) = C_\Gamma \left(\frac{\bar{r}^2 + \bar{r}_c^2}{1 + \bar{r}_c^2} \right)^{\chi/2}, \quad (4.31)$$

$$\chi = \frac{30 \text{St} (\alpha_n - 2\alpha_l)}{g_\sigma + 1 + 15\alpha_l \text{St}}, \quad \bar{r}_c = \left[\frac{15(\bar{D}_a^r + \bar{D}_B^r)}{(g_\sigma + 1 + 15\alpha_l \text{St}) \text{St}} \right]^{1/2}. \quad (4.32)$$

При пренебрежении броуновским движением и турбулентным ускорением частиц, когда $\bar{r}_c = 0$, (4.31) предсказывает сингулярность (неограниченный рост) Γ_{12} при $\bar{R} \rightarrow 0$. В этом случае при малых St из (4.31) и (4.32) следует $\Gamma_{12} \propto \bar{R}^{-St^2}$ [74; 75; 79]. Сингулярность при $\bar{R} \rightarrow 0$ может быть интерпретирована как кластеризация частиц, обусловленная их миграционным дрейфом в результате взаимодействия с мелкомасштабной турбулентностью. Согласно (4.25) этот дрейф вызван градиентом инкремента пульсаций скорости в направлении между частицами и приводит к их сближению. Броуновское движение и турбулентное ускорение частиц с разным временем релаксации способствуют размытию сингулярности в распределении частиц.

Коэффициенты α_l и α_n в структурных функциях (4.28), а следовательно, и χ в (4.32) являются функциями чисел Стокса St и Рейнольдса Re_λ . Однако влияние Re_λ не очень значительно, и полученные в [76] результаты при $St < 0,6$ и $Re_\lambda > 30$ могут быть аппроксимированы зависимостями

$$\alpha_l = 0,16 - 0,18St + 0,3St^2, \quad (4.33)$$

$$\chi = -6St^2 + 10,4St^3 - 7St^4. \quad (4.34)$$

На рис. 16 показано сравнение показателя степени χ , предсказываемого зависимостью (4.34), с данными прямого численного моделирования для монодисперсной системы частиц в изотропной турбулентности [75]. Как видно, имеет место хорошее согласие с результатами DNS.

Коэффициент C_T , являющийся постоянной интегрирования, не может быть найден из решения в окрестности точки $r = 0$ (4.31), не учитывая граничные условия при $r \rightarrow \infty$. Этот коэффициент может быть определен в результате сопряжения (4.31) с решением задачи в интервале $0 < r < \infty$. В результате такого сопряжения получено соотношение

$$C_T = 1 + 12St^2, \quad (4.35)$$

справедливое при $St < 0,6$. Подстановка (4.21), (4.23), (4.24), (4.28) и (4.31) в (4.5) дает турбулентно-броуновское ядро столкновений:

$$\beta_{\text{ТВ}}^{\text{col}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15v_f} \right)^{1/2} R^3 \left[1 + 15\alpha_l \text{St} + \frac{15}{R^2} \left(a_0 (\text{St}_2 - \text{St}_1)^2 + \frac{k_B T}{m_{12} u_k^2} \right) \right]^{1/2} \times \quad (4.36)$$

$$\times C_{\Gamma} \left(\frac{\bar{R}^2 + \bar{r}_c^2}{1 + \bar{r}_c^2} \right)^{\chi/2}.$$

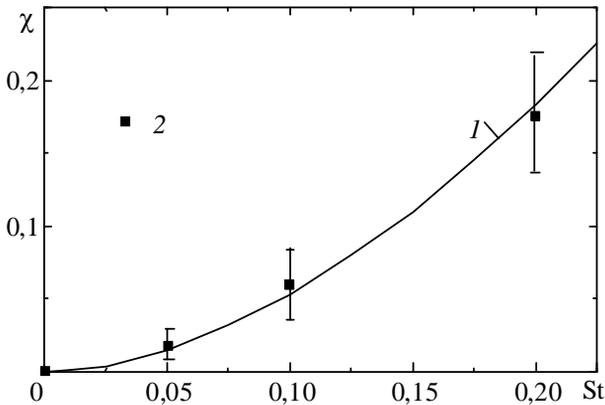


Рис. 16. Зависимость показателя степени χ от числа Стокса:
1 — формула (4.34), 2 — DNS [75]

Для монодисперсной системы одинаковых частиц ($\text{St}_1 = \text{St}_2 = \text{St}$) при пренебрежении броуновским движением из (4.36) следует

$$\beta_{\Gamma}^{\text{col}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15v_f} \right)^{1/2} R^3 (1 + 15\alpha_l \text{St})^{1/2} C_{\Gamma} \bar{R}^{\chi}. \quad (4.37)$$

Для безынерционных частиц ($\text{St} = \chi = 0$) из (4.37) получается турбулентное ядро столкновений Сэфмена—Тернера [80]

$$\beta_{\text{Т0}}^{\text{col}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15v_f} \right)^{1/2} R^3. \quad (4.38)$$

На рис. 17 показано сравнение формулы (4.37) с учетом (4.33)—(4.35) для турбулентного ядра столкновений малоинерционных частиц с результатами прямого численного моделирования [81]. Видно, что (4.37) пра-

вильно описывает данные DNS, предсказывая рост ядра столкновений с увеличением числа Стокса и уменьшением отношения диаметра частиц к пространственному микромасштабу. При уменьшении St ядро столкновений стремится к (4.38).

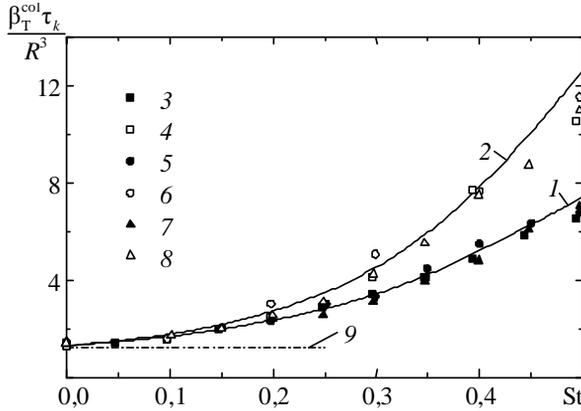


Рис. 17. Зависимость турбулентного ядра столкновений от числа Стокса: 1, 2 — формула (4.37); 3—8 — DNS [81]; 1, 3, 5, 7 — $\bar{R} = 1$; 2, 4, 6, 8 — $\bar{R} = 0,5$; 9 — формула (4.38)

При наличии коагуляции для определения постоянной интегрирования C в (4.30) привлечем соотношение (4.8) при $\phi = 1$. Тогда в результате интегрирования получим

$$\Gamma(\bar{R}) = C_T \left(\frac{\bar{R}^2 + \bar{r}_c^2}{1 + \bar{r}_c^2} \right)^{\chi/2} \times \left[1 + \frac{15\bar{R}^2 (\bar{R}^2 + \bar{r}_c^2)^{\chi/2}}{(g_\sigma + 1 + 15\alpha_l St) St} \left(\frac{\bar{S}_{p,II}(\bar{R})}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{\bar{R}}^{\infty} \frac{d\bar{r}}{\bar{r}^2 (\bar{r}^2 + \bar{r}_c^2)^{\chi/2+1}} \right]^{-1}, \quad (4.39)$$

$$\bar{S}_{p,II}(\bar{R}) = \left(\frac{1}{15} + \alpha_l St \right) \bar{R}^2 + a_0 (St_2 - St_1)^2 + \frac{k_B T}{m_{l2} u_k^2}, \quad (4.40)$$

где χ и \bar{r}_c определяются соотношениями (4.32) с учетом (4.33) и (4.34). Примем, что постоянная интегрирования C_T по-прежнему задается соот-

ношением (4.35). Интеграл, входящий в (4.39), аппроксимируем при помощи выражения

$$\int_{\bar{R}}^{\infty} \frac{d\bar{r}}{\bar{r}^2 (\bar{r}^2 + \bar{r}_c^2)^{\chi/2+1}} = \frac{f(\lambda)}{\bar{R} (\bar{R}^2 + \bar{r}_c^2)^{\chi/2} \bar{r}_c^2}, \quad f(\lambda) = 1 - \frac{\pi\lambda}{2} + \lambda \tan^{-1}\lambda,$$

$$\lambda = \frac{\bar{R}}{\bar{r}_c} \left(1 + \frac{\chi}{3} \right)^{1/2}. \quad (4.41)$$

Подстановка (4.39) и (4.40) с учетом (4.41) в (4.9) дает турбулентно-броуновское ядро коагуляции в предположении, что коэффициент захвата равен единице:

$$\beta_{TB}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu_f} \right)^{1/2} R^3 \left[1 + 15\alpha_l \text{St} + \frac{15}{R^2} \left(a_0 (\text{St}_2 - \text{St}_1)^2 + \frac{k_B T}{m_{12} u_k^2} \right) \right]^{1/2} \times$$

$$\times C_{\Gamma} \left(\frac{\bar{R}^2 + \bar{r}_c^2}{1 + \bar{r}_c^2} \right)^{\chi/2} \times \left[1 + \frac{15\bar{R} f(\lambda)}{\bar{r}_c^2 (g_{\sigma} + 1 + 15\alpha_l \text{St}) \text{St}} \left(\frac{\bar{S}_{p,II}(\bar{R})}{2\pi} \right)^{1/2} \right]^{-1}. \quad (4.42)$$

В безынерционном пределе ($\text{St} = 0$) из (4.42) следует [71]

$$\beta_{TB}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{\nu_f} \right)^{1/2} R^2 \left(\frac{R^2}{15} + \frac{k_B T \tau_k^2}{m_{12}} \right)^{1/2} \left[1 + \frac{R f(\lambda_0)}{(2\pi)^{1/2} D_B^r} \left(\frac{R^2}{15\tau_k^2} + \frac{k_B T}{m_{12}} \right)^{1/2} \right]^{-1}, \quad (4.43)$$

$$f(\lambda_0) = 1 - \frac{\pi\lambda_0}{2} + \lambda_0 \tan^{-1}\lambda_0, \quad \lambda_0 = R \left(\frac{A_{\sigma}}{15D_B^r \tau_k} \right)^{1/2}.$$

Отметим что функция $f(\lambda_0)$ для характеристики соотношения между турбулентным и броуновским механизмами коагуляции ранее использовалась в [82; 83].

Когда вкладом броуновской диффузии можно пренебречь ($\lambda_0 \rightarrow \infty$), из (4.43) следует

$$\beta_{T0}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu_f} \right)^{1/2} R^3 \left[1 + \frac{1}{A_{\sigma}} \left(\frac{5}{6\pi} \right)^{1/2} \right]^{-1}. \quad (4.44)$$

Согласно (4.38) и (4.44) $\beta_{T0}^{\text{coag}} / \beta_{T0}^{\text{col}} = 0,82$ при $A_{\sigma} = 2,3$, что оказывается близким к значению 0,83, полученному путем прямого численного моделирования [84; 85]. В экспериментах [86] получено, что отношение турбулентного ядра коагуляции малоинерционных частиц к ядру столкновений (4.38) приблизительно равно 0,7. Следовательно, различие между турбулентными ядрами столкновений и коагуляции для малоинерционных частиц не очень значительно.

При пренебрежении влиянием турбулентности ($\lambda_0 \rightarrow 0$) из (4.43) следует

$$\beta_B^{\text{coag}} = \frac{\beta_{B,Kn \rightarrow \infty}^{\text{coag}} \beta_{B,Kn \rightarrow 0}^{\text{coag}}}{\beta_{B,Kn \rightarrow \infty}^{\text{coag}} + \beta_{B,Kn \rightarrow 0}^{\text{coag}}}, \quad (4.45)$$

$$\beta_{B,Kn \rightarrow \infty}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi k_B T}{m_{12}} \right)^{1/2} R^2, \quad (4.46)$$

$$\beta_{B,Kn \rightarrow 0}^{\text{coag}} = 4\pi R D_B^r. \quad (4.47)$$

Зависимость (4.45) представляет собой известную аппроксимацию [87] для ядра броуновской коагуляции во всем диапазоне изменения размеров частиц — от свободномолекулярного режима (при больших числах Кнудсена), характерного для очень мелких частиц, до континуального режима (при малых числах Кнудсена), реализуемого для относительно крупных аэрозолей.

В литературе хорошо известен целый ряд близких к (4.45) теоретических зависимостей для описания коагуляции в переходном режиме [88; 89; 90], полученных в результате шивки или путем интерполяции формул для свободномолекулярного (4.46) и континуального (4.47) режимов. Так, в [90] предложена интерполяционная зависимость

$$\beta_B^{\text{coag}} = \frac{\beta_{B,Kn \rightarrow \infty}^{\text{coag}} \beta_{B,Kn \rightarrow 0}^{\text{coag}} \left(2\beta_{B,Kn \rightarrow \infty}^{\text{coag}} + \beta_{B,Kn \rightarrow 0}^{\text{coag}} \right)}{\left(\beta_{B,Kn \rightarrow 0}^{\text{coag}} \right)^2 + 2\beta_{B,Kn \rightarrow \infty}^{\text{coag}} \left(\beta_{B,Kn \rightarrow \infty}^{\text{coag}} + \beta_{B,Kn \rightarrow 0}^{\text{coag}} \right)},$$

объединяющая формулы (4.46) и (4.47) и отличающаяся от зависимости (4.45) во всем диапазоне чисел Кнудсена не более чем на несколько процентов.

Далее рассмотрим турбулентно-броуновскую коагуляцию монодисперсной системы стоксовых частиц, время релаксации которых определяется соотношением

$$\tau_p = \frac{\rho_p d_p^2}{18\rho_f \nu}, \quad (4.48)$$

где d_p — диаметр частиц; ρ_p и ρ_f — плотности частиц и сплошной среды; ν — вязкость среды. Согласно (4.48) для одинаковых частиц ($\bar{R} = \bar{d}_p$) число Стокса равно

$$St = \frac{\rho_p \bar{R}^2}{18\rho_f \nu}.$$

Безразмерный коэффициент относительной броуновской диффузии двух одинаковых частиц представляется как

$$\bar{D}_B^r = \frac{B}{\bar{R}}, \quad B = \frac{2k_B T}{3\pi\rho_f \nu u_k \eta^2} = \frac{2k_B T}{3\pi\rho_f} \left(\frac{\varepsilon}{\nu_f^{11}} \right)^{1/4}.$$

На рис. 18 показаны зависимости ядер столкновений (4.36) и коагуляции (4.42), отнесенных к турбулентному ядру столкновений для безынерционных частиц (4.38), от безразмерного диаметра частиц \bar{R} при разных значениях параметра B , характеризующего эффект броуновского движения. Отношение плотностей материала частиц и сплошной среды ρ_p / ρ_f принималось равным 900, что ограничивает диапазон изменения числа Стокса $St \leq 0,5$ при $\bar{R} \leq 0,1$. Кривые 1 и 5 (для $B = 0$) соответствуют пренебрежению вкладом броуновской диффузии частиц в ядра столкновений и коагуляции.

Очевидно, что роль броуновского движения возрастает с уменьшением диаметра частиц \bar{R} и увеличением параметра B . Разница между турбулентными ядрами столкновений и коагуляции оказывается не очень значительной не только для безынерционных, но и для инерционных частиц. В случае, когда роль броуновского движения оказывается существенной, разница между β^{col} и β^{coag} может быть значительной. Особенно сильное различие между ядрами столкновений и коагуляции, как следует из (4.45)—(4.47) с учетом соотношения $\beta_B^{\text{col}} = \beta_{B, \text{Kn} \rightarrow \infty}^{\text{coag}}$, характерно для броуновского континуального режима.

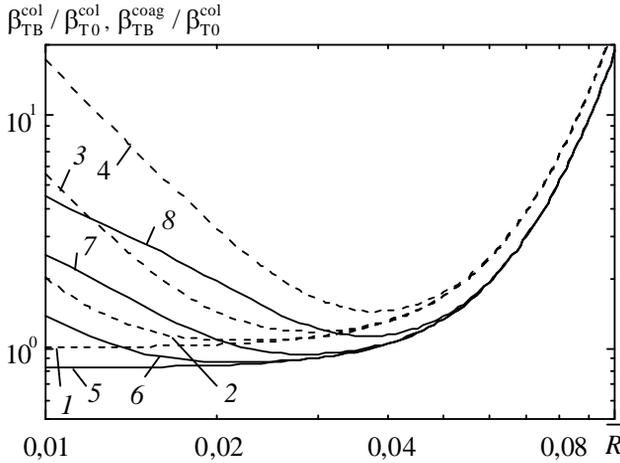


Рис. 18. Влияние броуновского движения на ядра столкновений (1—4) и коагуляции (5—8):

1, 5 — $B = 0$; 2, 6 — $B = 10^{-9}$; 3, 7 — $B = 10^{-8}$; 4, 8 — $B = 10^{-7}$

С целью некоторого упрощения формулы для турбулентно-броуновского ядра коагуляции заменим знаменатель в (4.42) соответствующим выражением в (4.43). В результате получим

$$\beta_{\text{TB}}^{\text{coag}} = \left(\frac{8\pi\varepsilon}{15\nu} \right)^{1/2} R^3 \left[1 + 15\alpha_l \text{St} + \frac{15}{R^2} \left(a_0 (\text{St}_2 - \text{St}_1)^2 + \frac{k_B T}{m_{12} u_k^2} \right) \right]^{1/2} \times \\ \times C_{\Gamma} \left(\frac{\bar{R}^2 + \bar{r}_c^2}{1 + \bar{r}_c^2} \right)^{\chi/2} \left[1 + \frac{R f(\lambda_0)}{(2\pi)^{1/2} D_B^{\nu}} \left(\frac{R^2}{15\tau_k^2} + \frac{k_B T}{m_{12}} \right)^{1/2} \right]^{-1}. \quad (4.49)$$

Отметим, что разница между формулами (4.42) и (4.49) во всем рассматриваемом диапазоне изменения числа Стокса (т. е. при $\text{St} < 0,6$) практически неощутима. С целью упрощения при вычислении \bar{r}_c в (4.32) также будем определять коэффициент вовлечения g_{σ} в (4.29) его предельным значением при $\text{Re}_{\lambda} \rightarrow \infty$:

$$g_{\sigma} = \frac{A_{\sigma}^2}{\text{St}(A_{\sigma} + \text{St})}. \quad (4.50)$$

Определение g_σ согласно (4.50) не вносит заметной погрешности в ядро коагуляции при $Re_\lambda > 30$.

На рис. 19 и 20 представлены результаты сравнения формулы (4.49) с данными прямого численного моделирования [91] для коагуляции монодисперсных частиц в приосевой зоне плоского канала при $Re_\lambda = 29,7$. Видно, что как отношение плотностей частиц и сплошной среды ρ_p / ρ_f , так и диаметр частиц d_p оказывают воздействие на ядро коагуляции, поскольку с изменением ρ_p / ρ_f и d_p согласно (4.48) изменяется время релаксации частиц τ_p .

Когда отношение плотностей и диаметр частиц уменьшаются, время релаксации и ядро коагуляции также уменьшаются. Однако для относительно малых значений отношения плотностей $\beta_{ТВ}^{coag}$ не зависит от ρ_p / ρ_f . Это объясняется тем, что как турбулентное ядро коагуляции безынерционных частиц (4.44), так и броуновское ядро коагуляции для континуального режима (4.47) не зависят от плотности частиц ρ_p . Из рис. 19 и 20 видно, что зависимость (4.49) хорошо согласуется с данными DNS для малоинерционных частиц.

Для аэрозольных частиц, размер которых не превышает 20 мкм, число Стокса, как правило, не превышает 0,6. Поэтому можно было бы ограничиться представлением формулы (4.49) для турбулентно-броуновского ядра коагуляции. Однако, имея в виду возможные приложения кода ПРОФИТ для более крупных аэрозолей, приведем зависимости для ядер турбулентных столкновения и коагуляции, справедливые не только для малоинерционных частиц. В [92] получена аналитическая зависимость для ядра столкновений частиц β_T^{col} , которая, несмотря на то что не учитывает эффект аккумуляирования, удовлетворительно согласуется с результатами прямых численных расчетов для изотропной турбулентности в широком диапазоне изменения числа Стокса. Эта зависимость основана на допущении, что совместная функция плотности вероятности скоростей несущего потока и частиц является коррелированным гауссовым распределением [93] и для столкновений частиц разного сорта имеет вид

$$\beta_T^{col} = (8\pi)^{1/2} R^2 u' \left[f_{u1} + f_{u2} - 2f_{u1}f_{u2} \left(1 - \frac{\bar{R}^2}{60^{1/2} Re_\lambda} \right) \right]^{1/2}, \quad (4.51)$$

$$f_{u\alpha} = \frac{2\Omega_\alpha + z^2}{2\Omega_\alpha + 2\Omega_\alpha^2 + z^2}, \quad \Omega_\alpha = \frac{\tau_{p\alpha}}{T_L}.$$

Здесь $f_{u\alpha}$ характеризует степень вовлечения частиц в турбулентное движение несущего потока. В безынерционном пределе ($\Omega_\alpha \rightarrow 0$, $f_{u\alpha} \rightarrow 1$) из (4.51) следует ядро столкновений Сэфмена—Тернера (4.38), а для высокоинерционных частиц ($\Omega_\alpha \gg 1$, $f_{u\alpha} \approx \Omega_\alpha^{-1}$) зависимость (4.51) переходит в известное ядро столкновений Абрахамсона [94]. Как показано в [92] путем сравнения с данными DNS [103], формула (4.49) удовлетворительно описывает турбулентное ядро столкновений разных частиц при всех значениях St_1 и St_2 за исключением значений, близких к единице.

Комбинация выражений (4.49) и (4.51) дает

$$\beta_{TB}^{\text{coag}} = (8\pi)^{1/2} R^2 \left\{ u'^2 \left[f_{u1} + f_{u2} - 2f_{u1}f_{u2} \left(1 - \frac{\bar{R}^2}{60^{1/2} \text{Re}_\lambda} \right) \right] + \frac{k_B T}{m_{12}} \right\}^{1/2} \times \left[1 + \frac{R f(\lambda_0)}{(2\pi)^{1/2} D_B^f} \left(\frac{R^2}{15\tau_k^2} + \frac{k_B T}{m_{12}} \right)^{1/2} \right]^{-1}. \quad (4.52)$$

На рис. 19 и 20 показано сравнение зависимости (4.52) с данными DNS [91]. Видно, что (4.52) хорошо описывает ядро коагуляции для относительно инерционных частиц, а для малоинерционных частиц приводит к довольно существенному завышению β^{coag} . Это обстоятельство связано с погрешностью (4.52) в описании относительной радиальной скорости частиц, время релаксации которых близко к колмогоровскому временному масштабу турбулентности. Итак, для определения турбулентно-броуновского ядра коагуляции малоинерционных частиц ($St_1, St_2 < 0,6$) следует использовать (4.49). Для расчета β_{TB}^{coag} в более широком диапазоне изменения чисел Стокса можно использовать (4.52). Следует иметь в виду, что, хотя последняя зависимость дает удовлетворительные результаты во всем диапазоне изменения чисел Стокса (в том числе и при малых St), применительно к малоинерционным частицам она оказывается заметно менее точной по сравнению с (4.49).

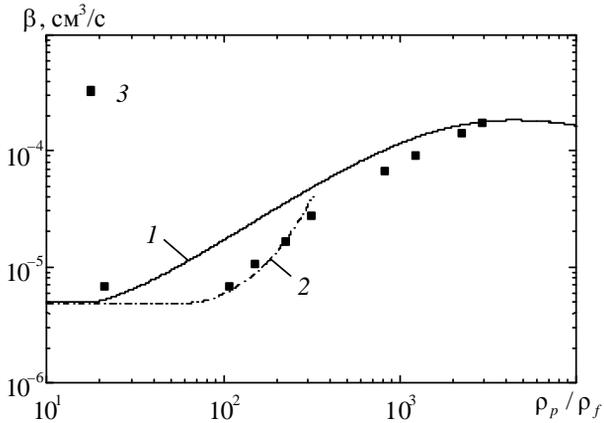


Рис. 19. Влияние отношения плотностей частиц и сплошной среды на ядро коагуляции в приосевой зоне канала ($d_p = 9,96$ мкм):
 1 — (4.49), 2 — (4.52), 3 — DNS [91]

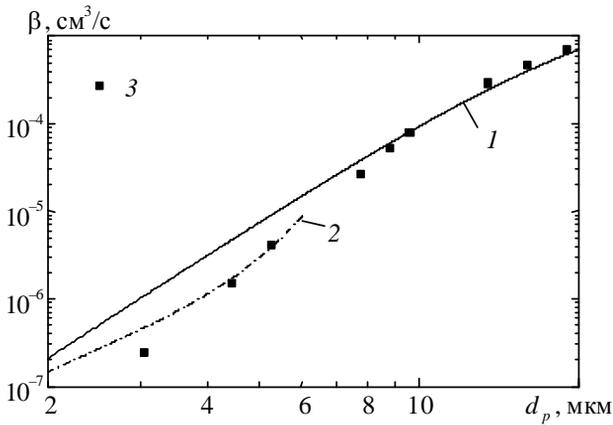


Рис. 20. Зависимость ядра коагуляции в приосевой зоне канала от диаметра частиц ($\rho_p / \rho_f = 713$):
 1 — (4.49), 2 — (4.52), 3 — DNS [91]

4.3. Вклад градиентного и гравитационного механизмов в ядро коагуляции

В пристеночной области потока существенную роль в столкновениях частиц может играть градиентный механизм [95]. Этот механизм обусловлен различными осредненными скоростями, приобретаемыми частицами в градиентном несущем потоке, и может иметь место как в монодисперсных, так и в полидисперсных системах частиц. Рассмотрим движение малоинерционных частиц, которые полностью вовлекаются в осредненное движение несущего потока. Профиль осредненной скорости сплошной среды в окрестности сталкивающихся частиц зададим в виде $\mathbf{U} = (sz, 0, 0)$, где s — градиент скорости. Тогда радиальная компонента осредненной относительной скорости двух частиц при их контакте ($r = R$)

$$W_r = sR \cos \psi \sin \varphi \cos \varphi. \quad (4.53)$$

В результате интегрирования в (4.12) с учетом (4.53) получаем [96]

$$\langle |w_r| \rangle = \left(\frac{2}{\pi} \langle w_r'^2 \rangle \right)^{1/2} F(S), \quad (4.54)$$

$$F(S) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \left[\frac{3^{2n} \pi^n \Gamma(2n+1) \Gamma(n+1/2) S^{2n}}{2^{4n+1} \Gamma^2(n+1) \Gamma(2n+3/2)} + \frac{3^{2n+2} \pi^{n+1} \Gamma(2n+3) \Gamma(n+3/2) S^{2n+2}}{2^{4n+4} (2n+1) \Gamma(n+1) \Gamma(n+2) \Gamma(2n+7/2)} \right], \quad S = \left(\frac{2}{\pi \langle w_r'^2 \rangle} \right)^{1/2} \frac{sR}{3}, \quad (4.55)$$

где $\Gamma(x)$ — гамма-функция, а параметр S характеризует соотношение между градиентным и турбулентно-броуновским механизмами столкновений.

Поскольку градиентный механизм не оказывает влияния на эффект аккумуляции частиц, (4.54) позволяет представить кинематическое ядро столкновений при совместном действии турбулентного, броуновского и градиентного механизмов в виде

$$\beta_{\text{TBS}}^{\text{col}} = \beta_{\text{TB}}^{\text{col}} F(S), \quad (4.56)$$

где турбулентно-броуновское ядро столкновений определяется формулой (4.36). При $S \rightarrow 0$ (4.56) переходит в (4.36), а при $S \rightarrow \infty$ из (4.56) с учетом (4.54) и (4.55) следует ядро Смолуховского для градиентного механизма столкновений

$$\beta_s^{\text{col}} = \frac{4sR^3}{3}. \quad (4.57)$$

На рис. 21 показано сравнение зависимости (4.56), где функция $F(S)$ задается (4.55) с результатами прямых численных расчетов [96] для безынерционных частиц в изотропной турбулентности при отсутствии броуновского движения.

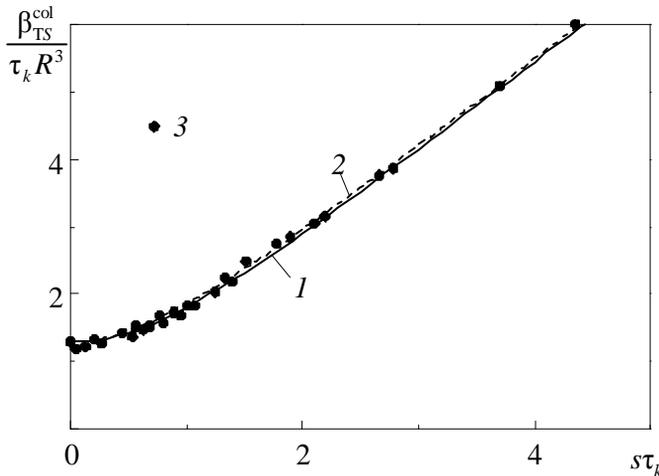


Рис. 21. Ядро столкновений в турбулентном потоке с однородным сдвигом скорости:
 1 — (4.39) и (4.37), 2 — (4.39) и (4.38), 3 — [96]

В [96] показано, что формула (4.56) с учетом (4.55) подтверждается данными прямого численного моделирования для безынерционных частиц при отсутствии броуновского движения, т. е. когда $\beta_{\text{TB}}^{\text{col}} = \beta_{\text{TO}}^{\text{col}}$, где $\beta_{\text{TO}}^{\text{col}}$ определяется турбулентным ядром столкновений Сэфмена—Тернера (4.38). Функция $F(S)$, описываемая формулой (4.55), с хорошей точностью может быть аппроксимирована зависимостью

$$F(S) = (1 + S^2)^{1/2}, \quad (4.58)$$

позволяющей с учетом (4.57) представить (4.56) в виде квадратичной интерполяции турбулентно-броуновского и градиентного ядер столкновений

$$\beta_{\text{TBS}}^{\text{col}} = \left[\left(\beta_{\text{TB}}^{\text{col}} \right)^2 + \left(\beta_{\text{S}}^{\text{col}} \right)^2 \right]^{1/2}. \quad (4.59)$$

Наибольшее практическое значение среди механизмов столкновений, связанных с наличием осредненной относительной скорости между частицами, имеет гравитационный механизм, обусловленный различными скоростями оседания (седиментации) частиц. Очевидно, что осредненная относительная скорость, обусловленная силой тяжести, может иметь место только для частиц разного сорта, т. е. с разным временем релаксации $\tau_{p\alpha}$. Однако следует отметить, что частицы могут иметь разные осредненные скорости не только из-за силы тяжести, но и вследствие других сил, например, под действием центробежной силы при обтекании искривленной поверхности. Для определенности далее будем рассматривать возникновение осредненной относительной скорости между двумя частицами как результат действия силы тяжести, поскольку обобщение на случай наличия других сил является очевидным.

Радиальная компонента осредненной относительной скорости между двумя частицами, обусловленная силой тяжести,

$$W_r = W_G \cos \varphi, \quad (4.60)$$

где $W_G = |\tau_{p2} - \tau_{p1}|g$ — разность скоростей седиментации двух тяжелых частиц. В результате интегрирования в (4.12) с учетом (4.60) получаем [94; 97; 98; 99]

$$\langle |w_r| \rangle = \left(\frac{2}{\pi} \langle w_r'^2 \rangle \right)^{1/2} F(G), \quad (4.61)$$

$$F(G) = \frac{1}{2} \exp\left(-\frac{4G^2}{\pi}\right) + \left(G + \frac{\pi}{8G}\right) \operatorname{erf}\left(\frac{2G}{\pi^{1/2}}\right), \quad G = \frac{\pi^{1/2} W_g}{(8 \langle w_r'^2 \rangle)^{1/2}}, \quad (4.62)$$

где параметр G характеризует соотношение между гравитационным и турбулентно-броуновским механизмами столкновений.

Поскольку гравитационный механизм также не оказывает влияния на эффект аккумуляции частиц, (4.61) позволяет представить кинематическое ядро столкновений при совместном действии турбулентного, броуновского и гравитационного механизмов в виде, аналогичном (4.56):

$$\beta_{\text{TBG}}^{\text{col}} = \beta_{\text{TB}}^{\text{col}} F(G). \quad (4.63)$$

При $G \rightarrow 0$ (4.63) переходит в (4.36), а при $G \rightarrow \infty$ из (4.63) с учетом (4.61) и (4.62) следует известное гравитационное ядро столкновений

$$\beta_G^{\text{col}} = \pi R^2 W_g. \quad (4.64)$$

Зависимость (4.62), как и (4.58), хорошо аппроксимируется формулой

$$F(G) = (1 + G^2)^{1/2}. \quad (4.65)$$

С учетом (4.65) выражение (4.63) аналогично (4.59) можно представить в виде квадратичной аппроксимации из турбулентно-броуновского и гравитационного ядер столкновений:

$$\beta_{\text{TBSG}}^{\text{col}} = \left[(\beta_{\text{TB}}^{\text{col}})^2 + (\beta_G^{\text{col}})^2 \right]^{1/2}. \quad (4.66)$$

Объединяя (4.59) и (4.66), получим выражение для кинематического ядра столкновений, учитывающего совместное действие турбулентного, броуновского, градиентного и гравитационного механизмов

$$\beta_{\text{TBSG}}^{\text{col}} = \left[(\beta_{\text{TB}}^{\text{col}})^2 + (\beta_s^{\text{col}})^2 + (\beta_G^{\text{col}})^2 \right]^{1/2}. \quad (4.67)$$

По аналогии с (4.67) ядро коагуляции, описывающее совместный эффект всех рассматриваемых механизмов, может быть представлено в виде

$$\beta_{\text{TBSG}}^{\text{coag}} = \left[(\beta_{\text{TB}}^{\text{coag}})^2 + (\beta_s^{\text{coag}})^2 + (\beta_G^{\text{coag}})^2 \right]^{1/2},$$

где соотношение между ядрами коагуляции и столкновений для градиентного и гравитационного механизмов выражается при помощи соответствующих коэффициентов захвата:

$$\beta_s^{\text{coag}} = \phi_s \beta_s^{\text{col}}, \quad \beta_G^{\text{coag}} = \phi_G \beta_G^{\text{col}}.$$

Информация о коэффициентах захвата (эффективности коагуляции) для градиентного и гравитационного механизмов столкновений содержится в [18; 29; 100—102].

Таким образом, в данной работе построены корреляционные зависимости для ядер столкновений и коагуляции аэрозольных частиц под действием броуновского, турбулентного, градиентного и гравитационного механизмов с учетом эффекта аккумуляции. Полученные зависимости учитывают взаимное влияние различных механизмов коагуляции. Представленные корреляции для ядра коагуляции имплантированы в код ПРОФИТ.

Литература

1. Дементьев Б. А. Ядерные энергетические реакторы. — М.: Энергоатомиздат, 1984.
2. Спассков В. П., Драгунов Ю. Г., Рыжов С. Б. и др. Расчетное обоснование теплогидравлических характеристик реактора и РУ ВВЭР. — М.: ИКЦ «Академкнига», 2004.
3. Афров А. М., Андрушечко С. А., Украинцев В. Ф. и др. ВВЭР-1000: Физические основы эксплуатации, ядерное топливо, безопасность. — М.: Универ. кн.; Логос, 2006.
4. Kissane M. P., Drosik I. Interpretation of fission-product transport behavior in the Phebus FPT0 and FPT1 tests // Nuclear Engineering and Design. — 2006. — Vol. 236. — P. 1210—1223.
5. Cousin F., Dieschbourg K., Jacq F. New capabilities of simulating fission product transport in circuits with ASTEC/SOPHAEROS v.1.3 // Nuclear Engineering and Design. — 2008. — Vol. 238. — P. 2430—2438.
6. Clement C. F., Clement R. A., Harrison R. G. Charge distribution and coagulation of radioactive aerosols // J. Aerosol Science. — 1995. — Vol. 26 (8). — P. 1207—1225.
7. Gensdarmes F., Boulaud D., Renoux A. Electrical charging of radioactive aerosols — comparison of the Clement-Harrison models with new experiments // J. Aerosol Science. — 2001. — Vol. 32. — P. 1437—1458.
8. Plumecoq et al. Fission product release modeling in the ASTEC integral code: the status of the ELSA module // 8th Int. Conf. On CANDU fuel, Honey Harbour, Ontario, 2003. — [S. 1.], 2003.
9. Veshchunov M. S., Ozrin V. D., Shestak V. E. et al. Development of the mechanistic code MFPR for modeling fission-product release from irradiated UO₂ fuel // Nuclear Engineering and Design. — 2006. — Vol. 236. — P. 179—200.
10. Безлепкин В. В., Сидоров В. Г., Лукин А. В. и др. Разработка компьютерных кодов для моделирования тяжелых аварий на АЭС // Теплоэнергетика. — 2004. — № 2. — P. 5—11.
11. Girshik S. L., Chiu C.-P. Kinetic nucleation theory: A new expression for the rate of homogeneous nucleation from an ideal supersaturated vapor // J. Chem. Phys. — 1990. — Vol. 93. — P. 1273—1277.
12. Seinfeld J. Y., Pandis S. N. Atmospheric Chemistry and Physics. — New York: Wiley, 1998.
13. Girault N., Dickinson S., Funke F. et al. Iodine behavior under LWR accident conditions: Lessons learnt from analysis of the first two Phebus FP

- tests // Nuclear Engineering and Design. — 2006. — Vol. 236. — P. 1293—1308.
14. IRSN-2007. Research and development with regard to severe accidents in pressurized water reactors: Summary and outlook. — [S. 1.], 2007. — (Rapport IRSN; Vol. 83).
 15. *Martin-Fuertes F., Barbero R., Martin-Valdepenas J. M., Jimenes M. A.* Analysis of source term aspects in the experiment Phebus FPT1 with the MELCOR and CFX codes // Nuclear Engineering and Design. — 2007. — Vol. 237. — P. 509—523.
 16. СОКРАТ/В1: Верификационный отчет базовой версии расчетного комплекса СОКРАТ/В1 / Отв. исполн. А. Е. Киселев, В. Ф. Стрижов, В. В. Безлепкин и др. — М.: ИБРАЭ РАН, 2008.
 17. *Loyalka S. K.* Mechanics of Aerosols in Nuclear Reactor Safety: A Review // Prog. Nuc. Energy. — 1983. — Vol. 1, № 12. — P. 1—56.
 18. *Williams M. M. R., Loyalka S. K.* Aerosol Science: Theory and Practice with Special Applications to the Nuclear Industry. — Oxford, U. K.: Pergamon Press, 1991.
 19. NUREG/CR-6189: A simplified model of aerosol removal by natural processes in reactor containments / Sandia National Laboratories. — Albuquerque, 1996.
 20. *Лискунов В. Н.* Теоретические модели кинетики формирования аэрозолей / РФЯЦ-ВНИИЭФ. — Саров, 2000.
 21. *Sorokin A., Vancassel X., Mirabel P.* Kinetic model for binary homogeneous nucleation in the H₂O-H₂SO₄ system: Comparison with experiments and classical theory of nucleation // The J. of Chemical Physics. — 2005. — Vol. 123. — P. 244508.
 22. *Vehkamaki H.* Classical nucleation theory in multicomponent systems. — Berlin; Heidelberg: Springer-Verl., 2006.
 23. *Alipchenkov V. M., Kiselev A. E., Strishov V. F.* et al. Advancement of modeling deposition and coagulation of aerosols in a nuclear reactor // Nuclear Engineering and Design. — 2009. — Vol. 239. — P. 641—647.
 24. *Gutti V. R., Loyalka S. K.* Thermophoretic deposition in a cylindrical tube: computations and comparison with experiments // Nuclear Technology. — 2009. — Vol. 166. — P. 121—132.
 25. *Schugard W. J., Heist R., Reiss H.* Theory of vapor phase nucleation in binary mixtures of water and sulfuric acid // J. Chem. Phys. — 1974. — Vol. 75. — P. 5298—5305.
 26. CRC Handbook of Chemistry and Physics / Ed. D. R. Lide. — [S. 1.], 2007.
 27. *Петров Ю. И.* Кластеры и малые частицы. — М.: Наука, 1986.

28. *McGraw R. J.* Two-dimensional kinetics of binary nucleation in sulfuric acid-water mixtures // *Chem. Phys.* — 1995. — Vol. 102. — P. 2098.
29. *Pruppacher H. R., Klett J. D.* *Microphysics of Clouds and Precipitation.* — New Mexico, USA: Kluwer Academic Publ., 1997.
30. *Gelbard F.* MAEROS User Manual. NUREG/CR-1391, SAND80-0822 / Sandia National Laboratories. — [S. l.], 1982.
31. *Murata K. K.* et al. User's Manual for CONTAIN 1.1. A computer code for severe nuclear reactor accident containment analysis. NUREG/CR-5026, SAND87-2309 / Sandia National Laboratories. — [S. l.], 1989.
32. *Summers R. M.* et al. MELCOR 1.8.0. A computer code for nuclear reactor severe accident source term and risk assessment analysis. NUREG/CR-5531, SAND90-0364 / Sandia National Laboratories. — [S. l.], 1991.
33. *Паўст П.* Аэрозоли: Введение в теорию. — М.: Мир, 1987. — 280 с.
34. *Talbot L., Cheng R. K., Schefer R. W., Willis D. R.* Thermophoresis of particles in a heated boundary layer // *J. Fluid Mech.* — 1980. — Vol. 101. — P. 737—758.
35. *Clift R., Grace J. R., Weber M. E.* *Bubbles, Drops and Particles.* — New York: Academic Press, 1978.
36. *Brock J. R.* On the theory of thermal forces acting on aerosol particles // *J. Colloid Sci.* — 1962. — Vol. 17. — P. 768—780.
37. *Шлуктин Г.* Теория пограничного слоя. — М.: Наука, 1974. — 712 с.
38. *McCoy D. D., Hanratty T. J.* Rate of deposition of droplets in annular two-phase flow // *Int. J. Multiphase Flow.* — 1977. — Vol. 3. — P. 319—331.
39. *Wood N. B.* A simple method of calculation of turbulent deposition to smooth and rough surfaces // *J. Aerosol Sci.* — 1981. — Vol. 12. — P. 275—290.
40. *Papavergos P. G., Hedley A. B.* Particle deposition behaviour from turbulent flows // *Chem. Eng. Res. Des.* — 1984. — Vol. 62. — P. 275—295.
41. *Friedlander S. K., Johnstone H. F.* Deposition of suspended particles from turbulent gas streams // *Ind. Engng Chem.* — 1957. — Vol. 49, № 7. — P. 1151—1156.
42. *Davies C. N.* *Deposition from moving aerosols* // *Aerosol Science.* — London: Academic Press, 1966.
43. *Cleaver J. W., Yates B.* A sublayer model for the deposition of particles from a turbulent flow // *Chem. Engng Sci.* — 1975. — Vol. 30. — P. 983—992.
44. *Fichman M., Gutfinger C., Pnueli D.* A model for turbulent deposition of aerosols // *J. Aerosol Sci.* — 1988. — Vol. 19, № 1. — P. 123—136.

45. *Fan F.-G., Ahmadi G.* A sublayer model for turbulent deposition of particles in turbulent ducts with smooth and rough surfaces // *J. Aerosol Sci.* — 1993. — Vol. 24. — P. 45—64.
46. *Kallio G. A., Reeks M. W.* A numerical simulation of particle deposition in turbulent boundary layer // *Int. J. Multiphase Flow.* — 1989. — Vol. 15, № 3. — P. 433—446.
47. *McLaughlin J. B.* Aerosol particle deposition in numerically simulated channel flow // *Phys. Fluids A.* — 1989. — Vol. 1, № 7. — P. 1211—1224; *McLaughlin J. B.* Inertial migration of a small sphere in linear shear flows // *J. Fluid Mech.* — 1991. — Vol. 224. — P. 261—274.
McLaughlin J. B. The lift on a small sphere in wall-bounded linear shear flows // *J. Fluid Mech.* — 1993. — Vol. 246. — P. 249—265.
48. *Ounis H., Ahmadi G., McLaughlin J. B.* Dispersion and deposition of Brownian particles from point sources in a simulated turbulent channel flow // *J. Colloid Interface Sci.* — 1991. — Vol. 147. — P. 233—250.
49. *Ounis H., Ahmadi G., McLaughlin J. B.* Brownian particle deposition a directly simulated turbulent channel flow // *Phys. Fluids A.* — 1993. — Vol. 5. — P. 1427—1432.
50. *Brooke J. W., Kontomaris K., Hanratty T. J., McLaughlin J. B.* Turbulent deposition and trapping of aerosols at the wall // *Phys. Fluids A.* — 1992. — Vol. 4, № 4. — P. 825—834.
51. *Brooke J. W., Hanratty T. J., McLaughlin J. B.* Free-flight mixing and deposition of aerosols // *Phys. Fluids.* — 1994. — Vol. 6, № 10. — P. 3404—3415.
52. *Chen M., McLaughlin J. B.* A new correlation for the aerosol deposition rate in vertical ducts // *J. Colloid and Interface Sci.* — 1995. — Vol. 169. — P. 437—455.
53. *Zhang H., Ahmadi G.* Aerosol particle transport and deposition in vertical and horizontal turbulent duct flows // *J. Fluid Mech.* — 2000. — Vol. 406. — P. 55—80.
54. *Wang Q., Squires K. D.* Large eddy simulation of particle deposition in a vertical turbulent channel flow // *Int. J. Multiphase Flow.* — 1996. — Vol. 22, № 4. — P. 667—683.
55. *Wang Q., Squires K. D., Chen M., McLaughlin J. B.* On the role of the lift force in turbulence simulations of particle deposition // *Int. J. Multiphase Flow.* — 1997. — Vol. 23, № 4. — P. 749—763.
56. *Деревич И. В., Зайчик Л. И.* Влияние термофореза на осаждение броуновских частиц в канале // *Теплофизика высоких температур.* — 1988. — Т. 26, № 1. — С. 137—146.

57. Деревич И. В., Зайчик Л. И. Осаждение частиц из турбулентного потока // Изв. АН СССР. Механика жидкости и газа. — 1988. — № 5. — С. 96—104.
58. Zaichik L. I., Nigmatulin B. I., Pershukov V. A. Modelling of dynamics of aerosols in near-wall turbulent flows and particle deposition in pipes // Advances in Multiphase Flow 1995. — Amsterdam: Elsevier, 1995. — P. 75—84; Zaichik L. I., Gusev I. N., Guseva E. I. Turbulent flow and precipitation of particles in channels // Engineering Turbulence Modelling and Experiments. — Amsterdam: Elsevier, 1990. — P. 907—916.
59. Slater S. A., Leeming A. D., Young J. B. Particle deposition from two-dimensional turbulent flows // Int. J. Multiphase Flow. — 2003. — Vol. 29. — P. 721—750; Гусев И. Н., Гусева Е. И., Зайчик Л. И. Модель осаждения частиц из турбулентного газодисперсного потока в каналах с поглощающими стенками // Изв. Рос. акад. наук. Механика жидкости и газа. — 1992. — № 1. — С. 58—65.
60. Shin M., Kim D. S., Lee J. W. Deposition of inertia-dominated particles inside a turbulent boundary layer // Int. J. Multiphase Flow. — 2003. — Vol. 29. — P. 893—926; Shin M., Lee J. W. Memory effect in the Eulerian particle deposition in a fully developed turbulent channel flow // J. Aerosol Sci. — 2001. — Vol. 32. — P. 675—693.
61. Derevich I. V. Statistical modelling of mass transfer in turbulent two-phase dispersed flows. 2: Calculation results // Int. J. Heat and Mass Transfer. — 2000. — Vol. 43, № 19. — P. 3725—3734.
62. Kröger C., Drossinos Y. A random-walk simulation of thermophoretic particle deposition in a turbulent boundary layer // Int. J. Multiphase Flow. — 2000. — Vol. 26. — P. 1325—1350.
63. Son J. S., Hanratty T. J. Limiting relation for the eddy diffusivity close to a wall // AIChE J. — 1967. — Vol. 13, № 4. — P. 689—696.
64. Liu B. Y. H., Agarwal J. K. Experimental observation of aerosol deposition in turbulent flow // J. Aerosol Sci. — 1974. — Vol. 5. — P. 145—155.
65. Uijtewaal W. S. J., Oliemans R. V. A. Particle dispersion and deposition in direct numerical and large eddy simulations of vertical pipe flows // Phys. Fluids. — 1996. — Vol. 18. — P. 2590—2604.
66. Сполдинг Д. Б. Конвективный массоперенос. — М.: Энергия, 1965. — 384 с.
67. Ерошенко В. М., Зайчик Л. И. Гидродинамика и тепломассообмен на проницаемых поверхностях. — М.: Наука, 1984. — 275 с.
68. Byers R. L. Particle deposition from turbulent streams by means of thermal force: PhD Thesis / Pennsylvania State Univ. — [S. l.], 1967.

69. *Johansen S. T.* The deposition of particles on vertical walls // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1991. — Vol. 17, № 3. — P. 355—376.
70. *Johansen S. T.* Thermal-inertial deposition of particles // *Proc. Int. Conf. on Multiphase Flows*. Tsukuba, Japan. 1991. — [S. 1.], 1991. — P. 415—421.
71. *Зайчик Л. И., Соловьев А. Л.* Ядра столкновений и коагуляции при броуновском и турбулентном движении аэрозольных частиц // *Теплофизика высоких температур*. — 2002. — Т. 40, № 3. — С. 460—465.
72. *Reade W. C., Collins L. R.* Effect of preferential concentration on turbulent collision rates // *Phys. Fluids*. — 2000. — Vol. 12, № 10. — P. 2530—2540.
73. *Wang L.-P., Wexler A. S., Zhou Y.* Statistical mechanical description and modelling of turbulent collision of inertial particles // *J. Fluid Mech.* — 2000. — Vol. 415. — P. 117—153.
74. *Zaichik L. I., Alipchenkov V. M.* Pair dispersion and preferential concentration of particles in isotropic turbulence // *Phys. Fluids*. — 2003. — Vol. 15, № 6. — P. 1776—1787.
75. *Chun J., Koch D. L., Rani S. L.* et al. Clustering of aerosol particles in isotropic turbulence // *J. Fluid Mech.* — 2005. — Vol. 536. — P. 219—251.
76. *Зайчик Л. И., Алипченков В. М.* Кластеризация малоинерционных частиц в изотропной турбулентности // *Теплофизика высоких температур*. — 2007. — Т. 45, № 1. — С. 66—76.
77. *Girimaji S. S., Pope S. B.* A diffusion model for velocity gradients in turbulence // *Phys. Fluids A*. — 1990. — Vol. 2, № 2. — P. 242—256.
78. *Zaichik L. I., Simonin O., Alipchenkov V. M.* Two statistical models for predicting collision rates of inertial particles in homogeneous isotropic turbulence // *Phys. Fluids*. — 2003. — Vol. 15, № 10. — P. 2995—3005.
79. *Balkovsky E., Falkovich G., Fouxon A.* Intermittent distribution of inertial particles in turbulent flows // *Phys. Review Letters*. — 2001. — Vol. 86, № 13. — P. 2790—2793.
80. *Saffman P. G., Turner J. S.* On the collision of drops in turbulent clouds // *J. Fluid Mech.* — 1956. — Vol. 1, Pt. 1. — P. 16—30.
81. *Zhou Y., Wexler A. S., Wang L.-P.* On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. II: Finite inertia case // *Phys. Fluids*. — 1998. — Vol. 10, № 5. — P. 1206—1216.
82. *Williams M. M. R.* A unified theory of aerosol coagulation // *J. Phys. D: Appl. Phys.* — 1988. — Vol. 21. — P. 875—886.
83. *Brunk B. K., Koch D. L., Lion L. W.* Hydrodynamic pair diffusion in isotropic random velocity fields with application to turbulent coagulation // *Phys. Fluids*. — 1997. — Vol. 9, № 9. — P. 2670—2691.

84. Wang L.-P., Wexler A. S., Zhou Y. On the collision rate of small particles in isotropic turbulence. I: Zero-inertia case // *Phys. Fluids*. — 1998. — Vol. 10, № 1. — P. 266—276.
85. Brunk B. K., Koch D. L., Lion L. W. Turbulent coagulation of colloidal particles // *J. Fluid Mech.* — 1998. — Vol. 364. — P. 81—113.
86. Delichatsios M. A., Probstein R. F. Coagulation in turbulent flow: theory and experiment // *J. Colloid and Interface Sci.* — 1975. — Vol. 51, № 3. — P. 394—405.
87. Park S. H., Lee K. W., Otto E., Fissan H. The log-normal size distribution theory of Brownian aerosol coagulation for the entire particle size range. Pt. 1: Analytical solution using the harmonic mean coagulation kernel // *J. Aerosol Sci.* — 1999. — Vol. 30, № 1. — P. 3—16.
88. Фукс H. A. Успехи механики аэрозолей. — М.: Изд-во АН СССР, 1961. — 160 с.
89. Loyalka L. S. Mechanics of aerosols in nuclear reactor safety: A review // *Progress in Nuclear Energy*. — 1983. — Vol. 12, № 1. — P. 1.
90. Otto E., Fissan H., Park S. H., Lee K. W. The log-normal size distribution theory of Brownian aerosol coagulation for the entire particle size range. Pt. 1: Analytical solution using Dahneke's coagulation kernel // *J. Aerosol Sci.* — 1999. — Vol. 30, № 1. — P. 17—34.
91. Chen M., Kontomaris K., McLaughlin J. B. Direct numerical simulation of droplet collisions in a turbulent channel flow. II.: Collision rates // *Int. J. Multiphase Flow*. — 1998. — Vol. 24. — P. 1105—1138.
92. Zaichik L. I., Simonin O., Alipchenkov V. M. Collision rates of bidisperse inertial particles in isotropic turbulence // *Phys. Fluids*. — 2006. — Vol. 18. — P. 0351101-1—035110-13.
93. Laviéville J., Deutsch E., Simonin O. Large eddy simulation of interactions between colliding particles and a homogeneous isotropic turbulence field // *Proc. 6th Int. Symp. on Gas-Particle Flows / ASME FED*. — Vol. 228. — [S. 1.], 1995. — P. 347—357.
94. Abrahamson J. Collision rates of small particles in a vigorously turbulent fluid // *Chem. Eng. Sci.* — 1975. — Vol. 30, № 11. — P. 1371—1379.
95. Smoluchowski M. V. Versuch einer mathematischen Theorie der Koagulationskinetik kolloider Lösungen // *Z. Phys. Chem.* — 1917. — Vol. 2. — P. 129—168.
96. Mei R., Hu K. C. On the collision rate of small particles in turbulent flows // *J. Fluid Mech.* — 1999. — Vol. 391. — P. 67—89.
97. Алипченков В. М., Зайчик Л. И. Частота столкновений частиц в турбулентном потоке // *Изв. Рос. Акад. наук. Механика жидкости и газа*. — 2001. — № 3. — С. 93—105.

98. *Gourdel C., Simonin O., Brunier E.* Two-Maxwellian equilibrium distribution function for the modeling of a binary mixture of particles // Proc. 6th Int. Conf. on Circulating Fluidized Beds. 1999. Frankfurt, Germany. — [S. 1.], 1990. — P. 205—210.
99. *Dodin Z., Elperin T.* On the collision rate in turbulent flow with gravity // Phys. Fluids. — 2002. — Vol. 14, № 8. — P. 2921—2924.
100. *Klett J. D., Davis M. N.* Theoretical collision efficiencies of cloud droplets at small Reynolds numbers // J. Atmospheric Sci. — 1973. — Vol. 30. — P. 107—117.
101. *Pertmer G. A., Loyalka S. K.* Gravitational collision efficiency of post hypothetical core disruptive accident liquid metal fast breeder reactor aerosols: spherical particles // Nuclear Technology. — 1980. — Vol. 47. — P. 70—90.
102. *Adler P. M.* Heterocoagulation in shear flow // J. Colloid Interface Sci. — 1981. — Vol. 83. — P. 106—115.
103. *Zhou Y., Wexler A. S., Wang L.-P.* Modelling turbulent collision of bidisperse inertial particles // J. Fluid Mech. — 2001. — Vol. 433. — P. 77—104.

Стохастические модели дисперсии в сильнонеоднородных геологических средах

О. С. Сорокикина, В. Н. Семенов, В. М. Головизнин

1. Введение

Дисперсия примеси в сильнонеоднородных трещиноватых средах представляет собой очень сложный процесс из-за большой дисперсии в поле скоростей распространения примеси. Информацию об исследованиях в этой области можно найти в [1—4]. Из-за значительных пространственных флуктуаций скорости распространения примеси в неоднородной среде дисперсия примеси большей частью меняется не по классическому закону Фике $R \sim t^{1/2}$. Во многих экспериментах было отмечено, что $R \sim t^{1/\alpha}$ с $\alpha < 2$ (супердиффузия) [5—16]. Наблюдалось и более сложное поведение примеси в неоднородных средах [4], когда характер процесса менялся в зависимости от масштаба явления.

Нам известно два натуральных эксперимента реального природного масштаба (подавляющее большинство экспериментов либо проводится в лабораторных условиях, либо имеют масштаб, не превышающий несколько метров) в Cape Cod [17] и Macrodispersion Experiment (MADE) [18; 19]. В экспериментах этого типа исследуется распространение трассера, инжектированного за короткое время в водоносный слой. Течение в слое после инъекции примеси происходит под действием естественного градиента и не подвергается никаким искусственным воздействиям (откачке, инъекции). Концентрация трассера измеряется с помощью сети наблюдательных скважин. Эксперименты этого типа в принципе дают возможность прямо наблюдать изменение размеров облака примеси со временем, а также пространственный профиль концентрации.

Водоносный слой в эксперименте MADE образован песчано-гравийной смесью с включениями глины и наносных пород и является крайне неоднородным, с большим разбросом локальных значений проницаемости. В экспериментах в водоносный слой инжектировались около 10 м^3 воды, одновременно содержащей разные трассеры включая «консервативные», такие как бромид, тритий (тритированная вода). Наблюдения продолжались от 15 до 20 месяцев.

Было обнаружено, что профили концентрации трития (MADE-2) существенно несимметричны в направлении среднего тренда перемещения трассеров, имеют сильно вытянутые в сторону течения хвосты, причем эти хвосты являются не экспоненциальными, а степенными. Профили очень своеобразны. Наблюдения распределения концентрации примесей, проводившиеся почти год, показали, что расширение масштабов плюма происходит главным образом в горизонтальном направлении, т. е. двумерным образом, а вертикальное расширение мало. Размеры плюма увеличиваются со временем быстрее, чем по классическому диффузионному закону Фике. При этом продольный (вдоль направления среднего течения) и поперечный размеры характеризуются разными значениями показателя α : $\alpha \approx 1,2$ для продольного размера и $\alpha \approx 1,5$ для поперечного ($\alpha = 2$ соответствует обычному диффузионному закону). С этим согласуются данные об изменении со временем максимальной и средней концентрации в выбросе.

Качественно похожие в отношении супердиффузионного характера расширения плюма результаты были получены и в эксперименте Cape Cod. Водоносный слой в этом случае также был песчано-гравийного состава, однако степень его неоднородности, по-видимому, была несколько ниже, чем в MADE. Так же, как и в MADE, вертикальная дисперсия плюма оказалась мала, так что диффузия была по существу двумерной. Было установлено, что расширение плюма в продольном к среднему потоку и поперечном направлениях происходит по-разному. Продольное расширение имеет супердиффузионный характер с показателем $\alpha \approx 1,65$. Поперечное рассеивание плюма описывается обычным диффузионным законом ($\alpha \approx 2$). Подробный анализ данных этих экспериментов можно найти в [20; 21].

Таким образом, в этих двух экспериментах непосредственным наблюдением за распространением трассеров в естественных условиях было установлено, что дисперсия примесей при естественной фильтрации в сильнонеоднородных водоносных слоях происходит аномальным образом и не может быть описана на основании классического диффузионного подхода. Процесс дисперсии примеси в реальной сильнонеоднородной среде заметно отличался от классического закона Фике. Причем в естественных условиях наблюдается резкая асимметрия в разных направлениях распространения.

Для моделирования поведения примеси в этих экспериментах с успехом использовались одномерные уравнения с дробной пространственной производной [11; 21—30]. Результаты моделирования для осредненных поперек потока концентраций трассера прекрасно ложились на экспериментальные данные. Хорошо зарекомендовали себя эти модели и для экспериментов в Cape Cod [21; 31]. Однако не было попыток моделировать при

помощи моделей такого типа реальные двумерные особенности процесса. На это были существенные причины.

Развитие двумерных моделей с дробной производной долгое время было сильно затруднено. Удавалось создать такие модели только для случая полной симметрии по обоим направлениям при отсутствии скошенности [22; 32; 33]. Этого недостаточно для описания наблюдаемых в реальности явлений, таких как в экспериментах MADE. Однако этих трудностей удалось избежать, перейдя к моделированию переноса примеси на основе стохастических моделей случайных блужданий, где перемещение частиц имеет плотность распределения $p(x)$ — так называемые α -стабильные распределения. Эти распределения имеют тяжелые хвосты. При $x \rightarrow \infty$ $p(x) \approx 1/x^{\alpha+1}$. В одномерном случае и в двумерном случае при отсутствии анизотропии (симметричные по направлениям модели) эти подходы (стохастические модели случайных блужданий FLM — Fractal Levy Motion и уравнения с дробными производными по пространству) эквивалентны, однако стохастические модели более гибкие и легко распространяются на многомерный случай при наличии произвольной скошенности и анизотропии по направлениям. Такой подход был развит в ИБРАЭ РАН, а недавние публикации свидетельствуют, что зарубежные ученые тоже двигаются в том же направлении [13; 29; 31; 34; 35].

В последнее время появилось много сообщений о непосредственных исследованиях геометрических характеристик сети трещин путем наблюдения следов выхода трещин на поверхность трещиноватой породы либо изучения пересечений трещин с внутренней поверхностью скважин при помощи специальной техники [36; 37].

Последние исследования статистики трещин в горных породах (распределения длин, апертур, ориентаций и т. д.), как правило, приводят к тому, что сети трещин могут быть представлены как фрактальные объекты и характеризоваться распределениями степенного типа, т. е. распределениями, не имеющими характерного пространственного масштаба. «Безмасштабность» распределений косвенно подтверждается механическими соображениями, согласно которым явления образования и роста трещин в твердом теле не зависят от какого-либо пространственного масштаба. В обзоре [37] показано, что наблюдаемые сети трещин в широком диапазоне масштабов усреднения обладают фрактальными свойствами.

Важнейшим с точки зрения водопроницаемости свойством сети трещин в непроницаемых (или почти непроницаемых) породах является их связность, взаимные соединения. Даже густая сеть трещин может быть непроницаемой для влаги, если отдельные трещины не соединены между собой.

Все изложенные данные дают основание считать, что теория фильтрации через сеть трещин должна включать описание этой сети. Кроме того, с опре-

деленными оговорками можно предположить, что стохастические процессы перемещения загрязнения или трассера в сети фрактальных трещин тоже имеют фрактальный характер. Согласно закону больших чисел независимо от конкретной функции распределения для смещений местоположения частиц примеси справедливы предельные теоремы. Любые случайные независимые перемещения с функцией распределения, характеризующейся конечной дисперсией, сходятся к гауссовым величинам, перемещения с тяжелыми хвостами в распределениях — к FLM. Кроме того, среди фрактальных процессов можно выделить класс не с независимыми, а с коррелированными приращениями (процессы с долгой памятью или процессы Харста, в зарубежной литературе их называют еще FBM — Fractal Brownian Motion). В отличие от полетов Леви, где дисперсия местоположения частицы бесконечна, дисперсия частиц для фрактальных броуновских частиц в FBM конечна и меняется по закону $R \sim t^H$, где H меняется от 0 до 1, что отвечает случаям как субдиффузии, так и супердиффузии.

Цель данной работы — разработка робастных генераторов случайных величин для процессов FLM и FBM и развитие на их основе моделей многомерных фрактальных стохастических блужданий с произвольным фактором асимметрии.

Кроме того, для задач прямого моделирования распространения примеси в неоднородных насыщенных и ненасыщенных средах предложен алгоритм построения случайной трещиноватой породы, где имеются две контрастные проводимости (некий аналог перколяционной среды). Но в отличие от перколяционной среды соседние по пространству (на расчетной сетке) проводимости не независимы между собой, а скоррелированы. Корреляция по пространству может быть как положительной, так и отрицательной в зависимости от параметра Харста. Алгоритм позволяет строить анизотропные среды по разным направлениям.

2. FLM-модели

Известно [38], что все устойчивые в широком смысле распределения — это распределения с конечной дисперсией либо распределения со степенными зависимостями на хвостах для плотности вероятности (с точностью до медленно меняющейся функции):

$$p(x) \approx x^{-(\alpha+1)}, \quad x \gg 1.$$

Только эти распределения имеют область притяжения. В дальнейшем нас будут интересовать только они. В соответствии с обобщенной предельной теоремой Гнеденко—Леви [38] область притяжения устойчивых в широком смысле степенных распределений совпадает со строго устойчивыми

(α -стабильными, фрактальными) распределениями Леви с тяжелыми степенными хвостами, если $0 < \alpha \leq 2$.

Основой для построения многомерных моделей FLM должен быть достаточно эффективный генератор α -стабильных случайных величин, причем при произвольном факторе асимметрии.

Генерация строго устойчивых случайных величин с тяжелыми хвостами затруднена из-за отсутствия аналитических выражений для функции распределения и тем более обратной ей. Исключения составляют распределения Гаусса, Коши и Леви [38].

Путь решения этой проблемы был впервые намечен в [33] для распределений с $\alpha < 1$, а затем обобщен на любые α [39]. Генераторы этого типа называют точными. Наряду с ними разрабатываются так называемые аппроксимационные генераторы, основанные на использовании обобщенной предельной теоремы. Так, для симметричных распределений такой генератор описан в [40]. Аппроксимационный генератор для несимметричных распределений предложен в [13; 41]. Такие генераторы могут быть более экономичными, чем точные. Однако генератор, предложенный в [13; 41], имеет сильную зависимость от внутренних параметров (cutoff parameter). В подразделе 2.1 описан генератор также аппроксимационного типа для моделирования случайных последовательностей с устойчивыми распределениями, но не страдающий этим недостатком.

2.1. Аппроксимационный генератор одномерных случайных величин с тяжелыми хвостами в распределениях с произвольным фактором асимметрии

Алгоритм основан на использовании обобщенной предельной теоремы Гнеденко—Леви. Функция распределения нормированной суммы независимых случайных величин X_i

$$\sum_{i=1}^n \frac{X_i}{a_n} - b_n,$$

где X_1, X_2, \dots, X_n — n случайных чисел со степенной асимптотикой распределения при больших x , стремится к строго устойчивому распределению (α -стабильному распределению Леви) при $n \rightarrow \infty$.

α -стабильное распределение Леви с тяжелыми хвостами может быть несимметричным относительно нуля. Фактор асимметрии может характеризоваться величинами

$$\beta_1 = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1 - F(x)}{1 - F(x) + F(-x)},$$
$$1 - \beta_1 = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{F(-x)}{1 - F(x) + F(-x)}.$$

Нормировочные константы определяются как

$$a_n = n^{1/\alpha},$$
$$b_n = E(X_i)n^{1-1/\alpha},$$
$$E(X_i) = \frac{A}{1-\alpha}(1-2\beta_1)$$

при $1 < \alpha < 2$, когда математическое ожидание $E(X_i)$ существует, и

$$a_n = n^{1/\alpha}, \quad b_n = 0$$

при $0 < \alpha \leq 1$, когда математического ожидания случайной величины X не существует.

Приведенные формулы дают способ построения генератора строго устойчивых случайных величин. Генерируются произвольные, устойчивые в широком смысле распределения, и сумма достаточного количества последовательных чисел из этой серии является аппроксимацией для строго устойчивой случайной величины.

Функция распределения для устойчивой в широком смысле величины выбирается из соображения наибольшей простоты для поиска обратной функции к функции распределения.

Ниже предложен и опробован один из возможных вариантов генератора случайных величин с тяжелыми хвостами для всего диапазона изменения параметров α и β .

В настоящее время известны аналитические выражения для плотности вероятности строго устойчивых распределений с тяжелыми хвостами для двух значений параметра α . Это симметричное распределение Коши ($\alpha = 1$)

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \frac{t}{t^2 + x^2}$$

и полностью асимметричное распределение Леви ($\alpha = 0,5$)

$$p(x) = \frac{t}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{x^{3/2}} e^{-\frac{t^2}{2x}}.$$

В предлагаемом генераторе для произвольных значений параметра α случайные величины генерируются по правилу

$$X_i = A \left(\frac{1}{y_i^{1/\alpha}} - 1 \right) \text{sign}(z_i),$$

где y_i, z_i — равномерно распределенные на отрезке $[0, 1]$ случайные величины; A — произвольная числовая константа, характеризующая интенсивность диффузии.

$$\text{sign}(z_i) = -1, \text{ если } z_i > \beta_1,$$

$$\text{sign}(z_i) = 1, \text{ если } z_i \leq \beta_1.$$

Такие случайные величины имеют область изменения от $-\infty$ до $+\infty$.

Нетрудно видеть, что при $x \rightarrow \infty$

$$F(-x) = \frac{A^\alpha}{(x+A)^\alpha} (1-\beta_1) \sim (1-\beta_1) A^\alpha x^{-\alpha},$$

$$F(x) = 1 - \frac{A^\alpha}{(x+A)^\alpha} (1-\beta_1) \sim 1 - \beta_1 A^\alpha x^{-\alpha}.$$

Плотность вероятности определяется соотношениями

$$p(-x) = \frac{A^\alpha}{(x+A)^{\alpha+1}} \alpha (1-\beta_1), \text{ если } 0 < \alpha \leq 2,$$

$$p(x) = \frac{A^\alpha}{(x+A)^{\alpha+1}} \alpha \beta_1, \text{ если } 0 < \alpha \leq 2.$$

Математическое ожидание для случая, когда оно существует и необходимо центрирование (если $1 < \alpha \leq 2$), равно

$$\frac{A}{1-\alpha} (1-2\beta_1).$$

На основе этого генератора разработана одномерная нестационарная стохастическая модель распространения примеси, для которой характерна

неограниченность дисперсии местоположения частиц примеси при разных реализациях процесса.

Отметим особо, что в стохастических моделях случайных блужданий, где местоположение частиц определяется как сумма перемещений за шаг по времени Δt , не обязательно добиваться на каждом временном шаге хорошей аппроксимации строго устойчивой случайной величины. Чем больше шаг по времени, тем точнее должна быть аппроксимация. При измельчении шага по времени начиная с некоторых пространственных масштабов сумма перемещений имеет распределение, стремящееся к строго устойчивому распределению Леви (соответствующие иллюстрации приведены ниже).

Проведена проверка скорости сходимости аппроксимационного генератора строго устойчивых случайных величин для различных значений параметров α и β_1 .

Количество случайных величин, устойчивых в широком смысле, которые используются для аппроксимационного генератора строго устойчивых случайных величин, далее обозначается как n_{jump} . Количество модельных частиц, привлеченных для построения функции плотности вероятности местоположения частиц, обозначаются n_j .

Установлено, что разработанный вариант генератора для случая $0 < \alpha < 1$ сходится достаточно быстро для всех значений β . Однако, чем больше асимметрия, тем длиннее серия, требуемая для сходимости.

Если $0 < \alpha \leq 0,5$, то длина серии $n = n_{\text{jump}} = 10$ оказывается практически достаточной даже для полной асимметрии. Дальнейшее увеличение длины серии не приводит к какому-то заметному изменению в плотности вероятности для серии (рис. 1). На больших расстояниях распределение имеет четко выраженную степенную зависимость (рис. 2).

В диапазоне $0,5 < \alpha < 1$ требуемая длина серии увеличивается: приемлемым для полностью асимметричного случая является $n_{\text{jump}} = 50$ (рис. 3).

На рис. 4 и 5 приведено сравнение аналитической плотности вероятности для распределений Леви, Коши и модельной плотности вероятности. По мере увеличения α ($1 < \alpha < 2$) скорость сходимости замедляется. Так, для $\alpha = 1,5$ в полностью асимметричном случае требуемая длина серии $n_{\text{jump}} = 100$ (для симметричного случая достаточно $n_{\text{jump}} = 50$ — рис. 6). При $\alpha = 1,9$ в полностью асимметричном случае приемлемая длина серии оказывается $n_{\text{jump}} = 200$.

Но в целом скорость сходимости представляется нам приемлемой для использования генератора при разработке стохастических моделей процесса распространения трассера с тяжелыми хвостами в распределениях.

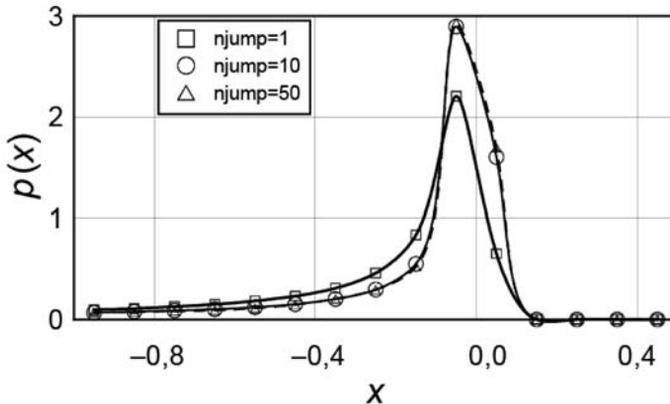


Рис. 1. Сходимость генератора случайных чисел к устойчивому распределению. $A = 0,5$, $\beta = 0,1$, $\alpha = 0,2$. Число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$. Кривая $n_{\text{jump}} = 1$ соответствует плотности вероятности исходной случайной величины

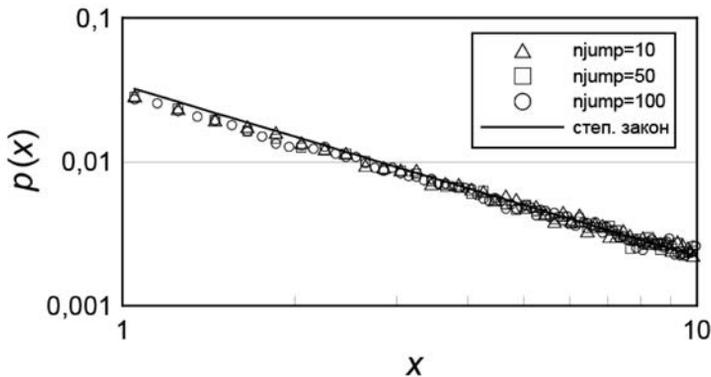


Рис. 2. Данные рис. 1 в логарифмическом масштабе для $|x| > 1$. Сплошная линия — степенная зависимость $\sim x^{1/1,2}$

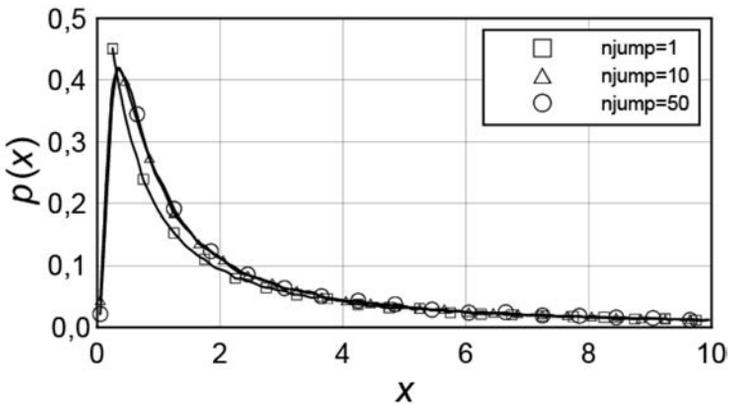


Рис. 3. Сходимость генератора случайных чисел к устойчивому распределению. $A = 0,7$, $\beta = 1$, $\alpha = 0,5$. Число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$. Кривая $n_{\text{jump}} = 1$ соответствует плотности вероятности исходной случайной величины

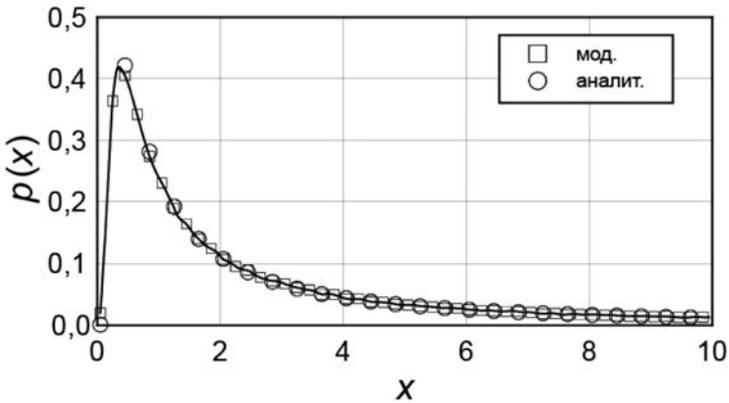


Рис. 4. Модельная и аналитическая кривые плотности вероятности для случая $A = 0,7$, $\beta = 1$, $\alpha = 0,5$. Число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$. Длина серии $n_{\text{jump}} = 50$

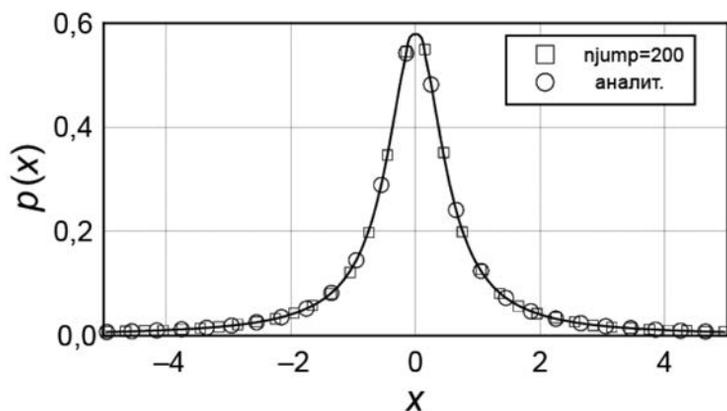


Рис. 5. Сходимость генератора случайных чисел к устойчивому распределению. $A = 1$, $\beta = 0,5$, $\alpha = 1$. Число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$

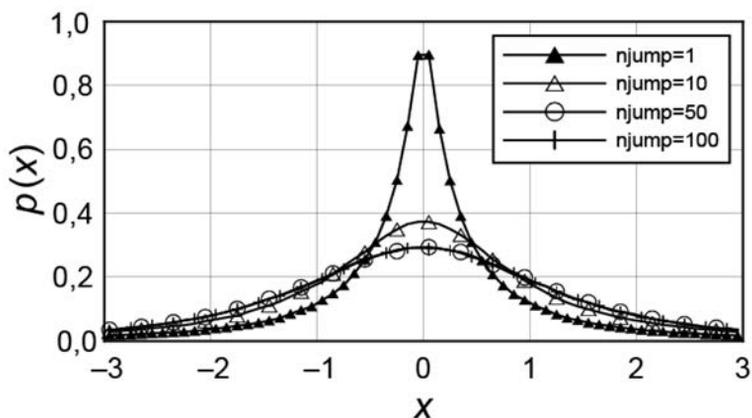


Рис. 6. Сходимость генератора случайных чисел к устойчивому распределению. $A = 1$, $\beta = 0,5$, $\alpha = 1,5$. Число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$. Кривая $n_{\text{jump}} = 1$ соответствует плотности вероятности исходной случайной величины

2.2. Стохастическая одномерная модель распространения трассера в сильнонеоднородной фрактальной среде

В этой модели рассчитываются траектории большого количества точек, испытывающих на каждом временном шаге случайные смещения, имеющие устойчивое распределение Леви. Стохастическое уравнение для координат частиц в процессе случайного блуждания:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t^{1/\alpha} \xi_i,$$

где x_i^n — координата i -й точки в n -й момент времени; ξ_i — случайная величина, которая либо получена на основе предложенного базового алгоритма для генерирования устойчивой случайной величины в широком смысле, либо является суммой таких величин (аппроксимация строго устойчивой случайной величины); Δt — временной шаг; α — параметр степенного распределения.

Приведенное уравнение дает смещение частицы за один временной шаг. В случае строгой устойчивости распределения ξ_i при таком определении этого смещения изменение распределения частиц за произвольное время T не будет зависеть от временного шага. В этом случае из уравнений движения частиц следует, что пространственный масштаб распределения частиц меняется со временем, как $r \sim t^{1/\alpha}$. Другими словами, движение автомодельно, и автомодельная координата имеет вид $r / t^{1/\alpha}$.

На рис. 7 приведены результаты сравнения модельных результатов и известного аналитического решения с $\alpha = 1$ (симметричного распределения Коши) на разные моменты времени. В качестве ξ_i здесь использовалась аппроксимация строго устойчивой случайной величины. Длина серии $n_{\text{jump}} = 50$. Как видно из рис. 7, имеет место хорошее согласие результатов.

На рис. 8 представлено решение для асимметричного распределения с $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,1$ на момент времени $t = 0,1$, шаг по времени $\Delta t = 0,001$. Здесь в качестве ξ_i берутся исходная устойчивая только в широком смысле случайная величина и аппроксимации строго устойчивой случайной величины с $n_{\text{jump}} = 30$. Нетрудно видеть, что после 100 шагов результаты практически одинаковы при любой длине серии.

Таким образом, при решении практических задач совершенно не обязательно на каждом шаге по времени использовать идеальную аппроксимацию строго устойчивого распределения. Более чем достаточно разбить интервал до момента времени, который представляет интерес, на число временных шагов от нескольких десятков до сотни.

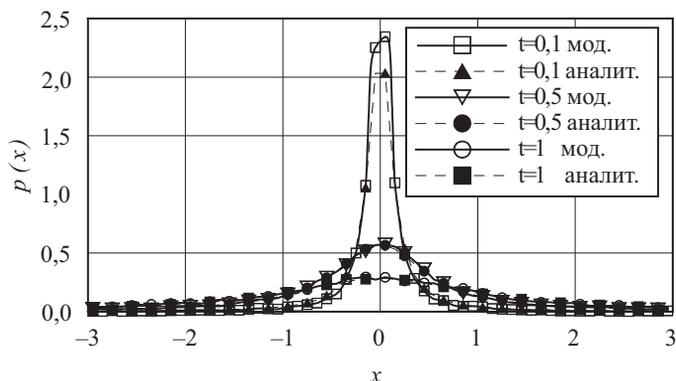


Рис. 7. Концентрация трассера от единичного мгновенного источника (плотность вероятности местоположения частиц) на разные моменты времени. Сравнение аналитического (аналит.) и модельного (мод.) результатов (симметричное распределение Коши)

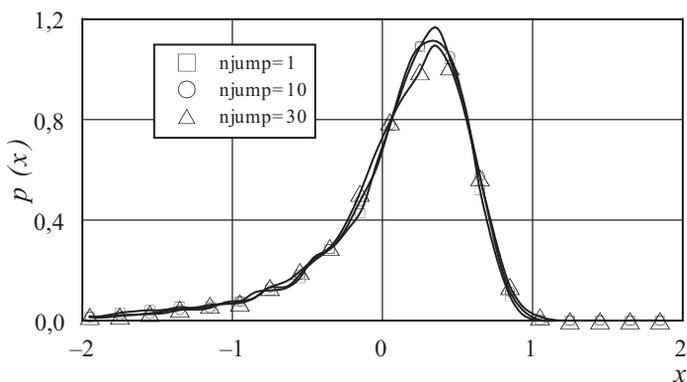


Рис. 8. Концентрация трассера от единичного мгновенного источника (плотность вероятности местоположения частиц) на разные моменты времени для разных длин серий n_{jump} . Параметры распределения $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,1$

2.3. Стохастические двумерные и трехмерные модели случайных блужданий

Одно из возможных обобщений представленной выше одномерной модели аномальной диффузии на многомерный случай очевидно: исходя из предположения о том, что движения частиц вдоль разных направлений независимы, получаем систему уравнений для трехмерного случая (модель А):

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t^{1/\alpha 1} \xi_i,$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t^{1/\alpha 2} \eta_i,$$

$$z_i^{n+1} = z_i^n + \Delta t^{1/\alpha 3} \mu_i,$$

где ξ_i , η_i , μ_i — строго устойчивые случайные величины с тяжелыми хвостами в распределениях. Здесь представлен наиболее общий вариант, когда величины ξ_i , η_i , μ_i имеют, вообще говоря, разные параметры распределения α и β (модель А).

Разработаны две версии двумерной модели случайных блужданий. Первая основана на использовании первых двух уравнений трехмерной модели А. Двумерная осесимметричная версия стохастической модели (модель В) описывается уравнениями

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t^{1/\alpha} \xi_i \cos \theta_i,$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t^{1/\alpha} \xi_i \sin \theta_i,$$

где ξ_i — случайные величины, которые являются аппроксимацией строго устойчивых; θ_i — равномерно распределенная на отрезке $[0, \pi]$ случайная величина, которая не меняется со временем.

Для сглаживания результатов при вычислении концентрации, когда число пробных частиц относительно невелико, считалось, что каждая частица представляет собой крупную частицу кубической формы с однородно распределенной плотностью. Вклад в плотность от каждой частицы в данной ячейке расчетной сетки полагался пропорциональным доле ее объема, оказавшейся внутри ячейки. Размеры объема могут варьироваться в пределах от одного до двух размеров ячейки.

Результаты использования двумерной модели В совпадают с известными двумерными осесимметричными аналитическими решениями Коши и Леви [38]. Расчет по модели А в сравнении с аналитическим решением при наличии анизотропии по направлениям на разные моменты времени представлен на рис. 9 и 10. Концентрации трассера от мгновенного единичного источника соответствуют аналитические плотности вероятности местоположения частиц для случая, когда движение по оси x соответствует параметрам $\alpha 1 = 0,5$; $\beta = 1$, а по оси y — параметрам $\alpha 2 = 1$; $\beta = 0,5$ для различных моментов времени.

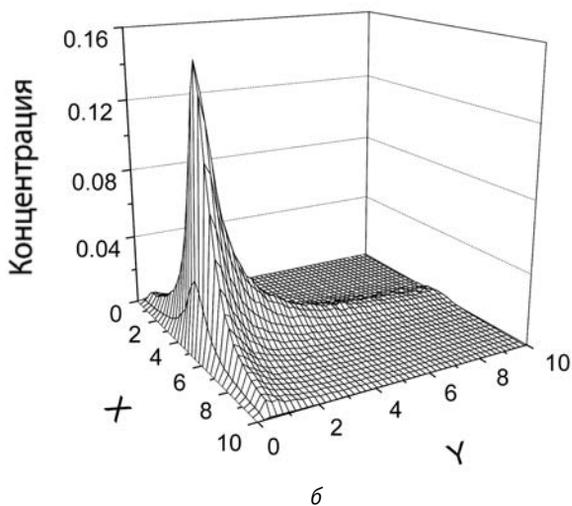
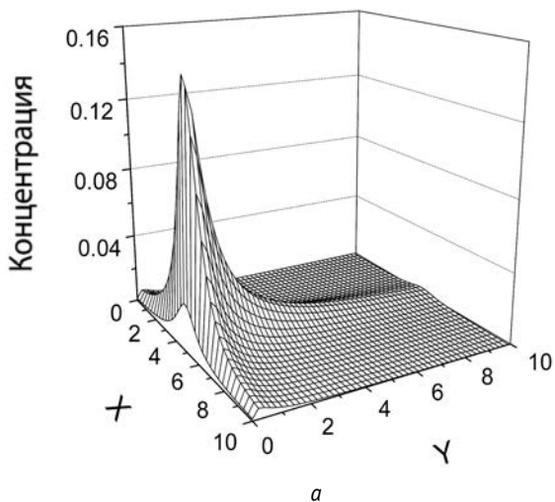
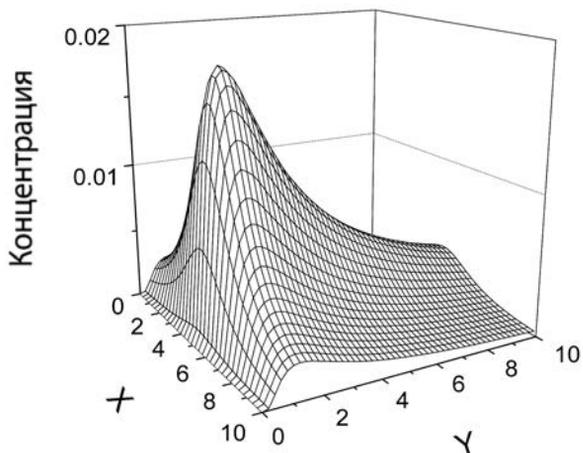
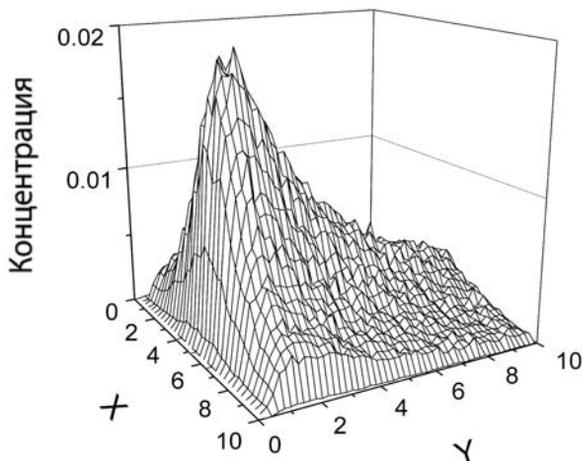


Рис. 9. Концентрация трассера от единичного мгновенного источника (плотность вероятности местоположения частиц) на момент времени $t = 1$:
 a — аналитическое решение; b — модельное решение



a



б

Рис. 10. Концентрация трассера от единичного мгновенного источника (плотность вероятности местоположения частиц) на момент времени $t = 2$:
a — аналитическое решение; *б* — модельное решение

2.4. Сравнение стохастической модели FLM и модели дробной диффузии

Проведено сравнение результатов моделирования распространения примеси с использованием одномерной модели дробной диффузии Римана—Лиувилля [28; 30—32; 42—45] и одномерной стохастической модели. Для одномерного случая результаты моделирования динамики распространения примеси по стохастической модели и разностного аналога интегро-дифференциальной модели с дробной производной практически совпадают.

Расчеты проводились при одинаковых шагах по времени и пространству. Нетрудно видеть, что на практике даже для полностью несимметричного распределения при $\alpha = 1,5$ вполне достаточно использовать серию генераторов длиной $n_{jump} = 10$ (рис. 11). Шаг по времени — 0,01. Поэтому уже на первый момент времени, представленный на рис. 11, получаем практически строго устойчивое распределение. Концентрации, рассчитанные по двумерной симметричной модели дробной диффузии Римана—Лиувилля и с использованием двумерной стохастической модели, тоже близки. Примеры приведены на рис. 12 и 13.

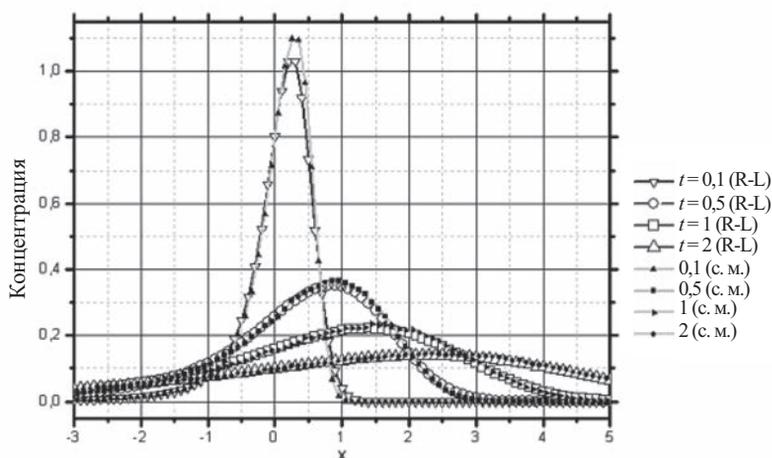
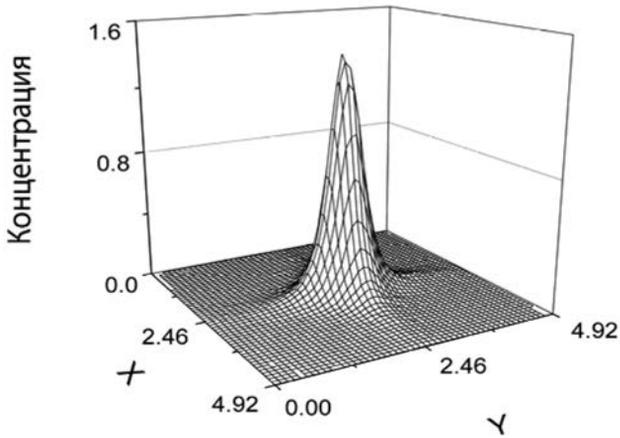
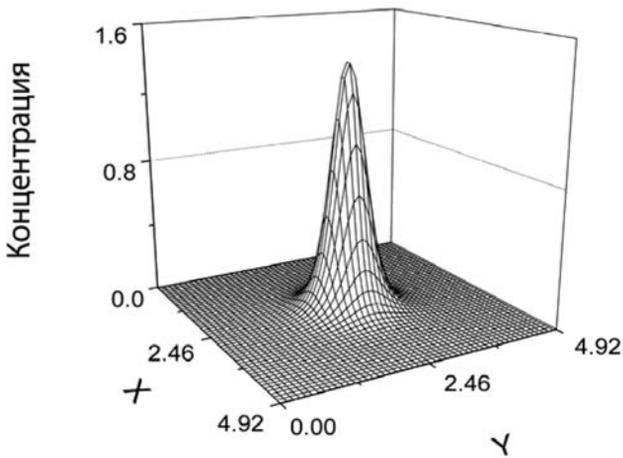


Рис. 11. Сравнение концентраций, рассчитанных по модели дробной диффузии Римана—Лиувилля (R-L), с одномерной стохастической моделью (с. м.) на разные моменты времени



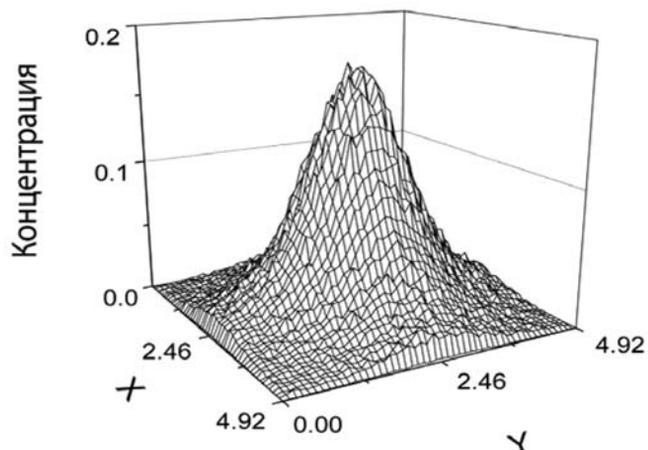
а



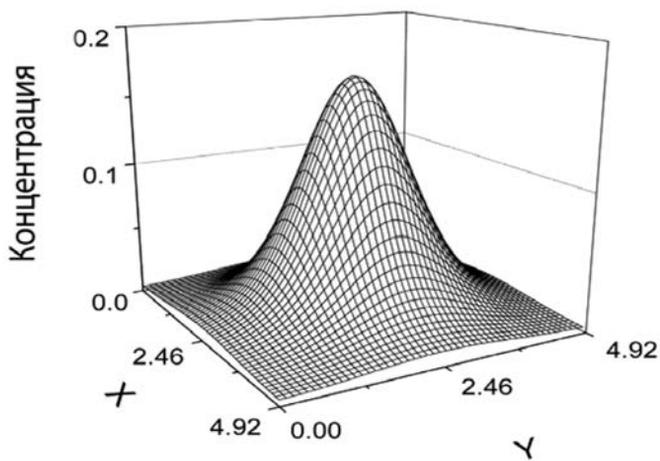
б

Рис. 12. Сравнение концентраций, рассчитанных по двумерной симметричной модели дробной диффузии Римана—Лиувилля, с двумерной стохастической моделью $\alpha = 0,5$, $t = 0,5$:

а — модель дробной диффузии Римана—Лиувилля; б — стохастическая модель



а



б

Рис. 13. Сравнение концентраций, рассчитанных по двумерной симметричной модели дробной диффузии Римана—Лиувилля, с двумерной стохастической моделью $\alpha = 0,5$, $t = 2$:

а — модель дробной диффузии Римана—Лиувилля; б — стохастическая модель

2.5. Некоторые статистические закономерности фрактальных полетов Леви

Как известно, одномерное распределение концентрации от точечного мгновенного источника при обычной диффузии таково, что существуют моменты всех порядков по пространству, в частности,

$$\langle r^2 \rangle = \int c(x)r^2 dx \sim t.$$

При случайных блужданиях с распределением Леви профиль концентрации имеет степенной хвост с показателем α на больших расстояниях, поэтому второй и высшие моменты не существуют.

Можно поставить вопрос о моментах низших порядков, в том числе о моментах «дробного порядка», которые естественно определить как

$$\langle r^\gamma \rangle = 2 \int_0^\infty c(x)x^\gamma dx,$$

где $\gamma < \alpha$. Так, определенные моменты существуют и в принципе могут быть вычислены.

Заметим, что для классической диффузии математическое ожидание

$$\begin{aligned} \langle r^\gamma \rangle &= 2 \int_0^{+\infty} x^\gamma \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{x^2}{2t}} dx = 2t^{\gamma/2} / \sqrt{\pi} \int_0^{+\infty} 2^{\gamma/2} \left(\frac{x^2}{2t}\right)^{\gamma/2} e^{-\frac{x^2}{2t}} d\frac{x}{\sqrt{2t}} = \\ &= t^{\gamma/2} \text{const} \end{aligned}$$

для любого γ .

Как уже отмечалось, распределение частиц является автомодельным, т. е. зависит только от автомодельной переменной $r/t^{1/\alpha}$ (при обычной диффузии профиль концентрации определяется отношением $r/t^{1/2}$).

Аналитическое выражение для плотности вероятности полетов Леви, как правило, неизвестно (за исключением двух случаев, отмеченных выше). Однако, если исходить из автомодельности плотности вероятности, временная зависимость моментов распределения может быть установлена. Из условия нормировки

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} p(x/t^{1/\alpha}) dx = 1 \Rightarrow C = t^{-1/\alpha}$$

следует, что нормировочная константа пропорциональна $t^{-1/\alpha}$. Тогда

$$\begin{aligned} \langle r^\gamma \rangle &= 2t^{-1/\alpha} \int_0^{+\infty} x^\gamma p\left(\frac{x}{t^{1/\alpha}}\right) dx = \\ &= 2t^{\gamma/\alpha} \int_0^{+\infty} \left(\frac{x}{t^{1/\alpha}}\right)^\gamma p\left(\frac{x}{t^{1/\alpha}}\right) d\frac{x}{t^{1/\alpha}} = t^{\gamma/\alpha} \text{const.} \end{aligned}$$

Это соотношение справедливо только для тех значений γ , при которых сходится несобственный интеграл, т. е. при $\gamma < \alpha$. Для классической диффузии, как было показано,

$$\langle r^\gamma \rangle \sim t^{\gamma/2}, \text{ а } \langle r^\gamma \rangle^{1/\gamma} \sim t^{1/2}.$$

Для аномальной диффузии с полетами Леви

$$\langle r^\gamma \rangle^{1/\gamma} \sim t^{1/\alpha} \quad (\gamma < \alpha, \quad 0 < \alpha < 2).$$

Отсюда следует, что величина математического ожидания $\langle r^\gamma \rangle^{1/\gamma}$ в случае аномальной диффузии всегда растет со временем быстрее, чем при классической, причем разница возрастает с уменьшением α .

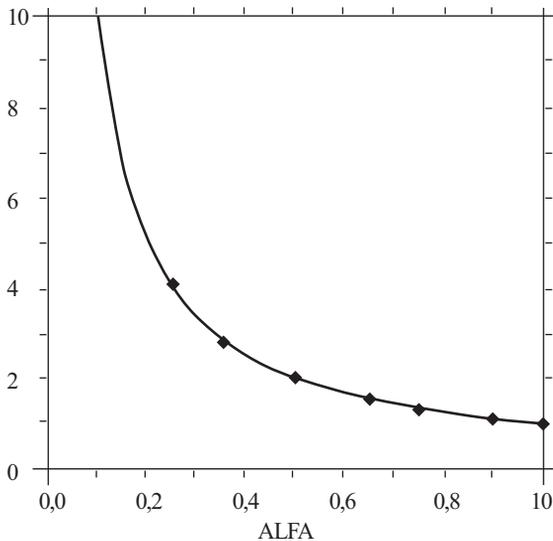


Рис. 14. Аппроксимация показателя зависимости $\langle r^{0,1} \rangle^{10}$ от времени. Маркеры — для модельных расчетов. Сплошная линия — теоретическая зависимость $1/\alpha$

На рис. 14 представлены результаты аппроксимации $1/\alpha$ для $\langle r^{0.1} \rangle^{10} \sim t^{1/\alpha}$, где сплошной линией изображена теоретическая кривая, а квадратными маркерами показаны результаты расчетов. Совершенно такие же закономерности прослеживаются для трехмерных моделей.

3. Модели FBM

Статистические особенности FBM таковы, что не существует сходимости дисперсии местоположения частиц в разные моменты времени к определенной функции, зависящей от времени. Изменение количества частиц, разные реализации приводят к разным величинам. Только для дробных моментов, как показано выше, имеется сходимость.

В экспериментах удается оценить с той или иной степенью точности, что дисперсия может меняться по степенному закону, отвечающему как супердиффузии, так и субдиффузии. Данный раздел посвящен стохастическим моделям таких процессов.

3.1. Одномерные модели FBM

Ниже описан генератор для случайных величин, перемещения которых в разные моменты времени скоррелированы, причем корреляционная функция может иметь как положительные, так и отрицательные тяжелые степенные хвосты.

FBM — семейство фрактальных случайных нестационарных процессов, зависящих от так называемого параметра Харста H ($0 < H < 1$). Особенностью этих процессов являются скоррелированные приращения. Если $0,5 < H < 1$, корреляционная функция положительна и имеет степенные хвосты. Если же $0 < H < 0,5$, хвосты у корреляционной функции для приращений тоже степенные, но отрицательные. Такие процессы также называют процессами с долгой памятью. В частном случае $H = 0,5$ приращения нескоррелированы.

В последние годы было найдено много применений этих процессов в моделировании различных процессов в физике, а также в геологии. Таким образом, развитие робастного алгоритма для моделирования ФБП имеет не только теоретическую, но и практическую ценность, в частности, для моделирования фрактальных сетей трещин и случайных броуновских блужданий с коррелированными приращениями.

Хотя было предложено много алгоритмов, ни один из них не удовлетворял одновременно двум критериям: точности и скорости (эффективности). Обзор таких алгоритмов можно найти, например, в [46]. Среди множества

алгоритмов наиболее распространены Midpoint Displacement и Fourier Filtering Method. Midpoint Displacement — быстрый и эффективный алгоритм. Однако он не ведет к процессу со стационарным приращением. Таким образом, процесс, сгенерированный этим методом, не является подлинным FBM. Метод Fourier Filtering основан на спектральных свойствах FBM. Он использует преобразование Фурье, чтобы сгенерировать процесс, имеющий спектральную плотность $S(f) \propto f^{(1+2H)}$. Однако эта степенная зависимость выведена усреднением по времени или пространству и, следовательно, является приближением, так как FBM — не стационарный процесс и не процесс с временным или пространственно независимым спектром. Этот метод хорош только в том случае, если частота f относительно велика. Следовательно, неточности при моделировании с помощью процесса Fourier Filtering неизбежны.

Описанный ниже алгоритм генерации FBM имеет довольно высокую точность, и на наш взгляд, достаточно робастен как для моделирования фрактальных блужданий с коррелированными приращениями во времени, так и для моделирования величин со скоррелированными по пространству приращениями.

Для одномерного FBM с индексом H ($0 < H < 1$) для любого $x \geq 0$ и $r \geq 0$ приращение $b_H(x+r) - b_H(x)$ следует распределению с нулевым средним и дисперсией $r_0 r^{2H}$ следующего вида:

$$P\{B_H(x+r) - B_H(x) \leq z\} = \frac{1}{\sqrt{2\pi r_0 r^{2H}}} \int_{-\infty}^z \exp\left(-\frac{u^2}{2r_0 r^{2H}}\right) du,$$

где r_0 — нормировочная константа. Аргумент x представляет собой время или пространственную координату. Когда $H = 0,5$, FBM превращается в обыкновенное броуновское движение. Ковариационная функция для FBM имеет вид

$$\text{cov}\{B_H(x), B_H(x+r)\} = \frac{r_0}{2} [x^{2H} + (x+r)^{2H} - |r|^{2H}], \quad x \geq 0, \quad x+r \geq 0.$$

Почти все предыдущие разработанные методы имели дело непосредственно с FBM. Это делало моделирование сложным из-за нестационарных свойств FBM. В [46] применена иная стратегия, а именно используются приращения FBM. FBM имеет стационарные приращения, а моделировать стационарный процесс значительно проще, чем нестационарный. Рассмотрение приращений дает возможность разработать алгоритм, который одновременно точен и эффективен. Приращение FBM определяется как

$$W_H(x) = B_H(x + \Delta x) - B_H(x), \quad x \geq 0,$$

где $W_H(x)$ — фрактальный белый шум, при $H = 0,5$ превращающийся в обыкновенный белый шум. $W_H(x)$ — дискретный стационарный процесс с нулевым средним и вариацией $r_0 \Delta x^{2H}$. Вместо того чтобы моделировать ФБД напрямую, будем моделировать фрактальный белый шум $W_H(x)$. Затем FBM с индексом H может быть получено суммированием фрактально-белого шума с тем же индексом H .

Может показаться, что Δx определяет разрешение моделирования и надо использовать различные Δx для моделирования процессов с различными разрешениями. В действительности процесс с любым разрешением может быть получен с использованием одного и того же Δx . Это следствие того факта, что траектории FBM — самоподобные фракталы и инварианты относительно масштаба. Два процесса $B_H(x)$ и $B_H(\tau x) / \tau^H$ (где τ — константа) статистически идентичны. Следовательно, процесс с любым разрешением может быть получен после моделирования одного процесса $B_H(x)$ при $\Delta x = 1$, в котором x принимает только целые значения $0, 1, 2, \dots, N$.

Ковариационная функция $W_H(x)$ имеет вид

$$\begin{aligned} C(r) &= \text{cov}\{W_H(x), W_H(x+r)\} = \\ &= E\left[\{B_H(x+1) - B_H(x)\}\{B_H(x+r+1) - B_H(x+r)\}\right] = \\ &= \frac{r_0}{2} (|r+1|^{2H} + |r-1|^{2H} - 2|r|^{2H}), \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \end{aligned}$$

где E — математическое ожидание.

Функция спектральной плотности имеет вид

$$S(f) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} C(r) \cos(2\pi r f), \quad -\frac{1}{2} \leq f \leq \frac{1}{2},$$

где f — частота (в Гц) или пространственная частота. Ковариационная функция может быть представлена через обратное Фурье-преобразование $S(f)$:

$$C(r) = \int_{-1/2}^{1/2} S(f) \cos(2\pi r f) df, \quad r = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Спектральная плотность и функция ковариации стационарного процесса могут быть выражены одна через другую с помощью Фурье-преобразования. Следовательно, заданная функция спектральной плотности может быть легко смоделирована с использованием любого спек-

трального метода. Мы использовали следующий алгоритм для моделирования приращений нестационарного FBM:

$$W_H(x) = \sqrt{2} \sum_{k=-N/2}^{N/2-1} [S(f_k) \Delta f]^{1/2} \cos(2\pi f_k x + \phi_k), \quad x = 0, 1, 2, \dots, N,$$

где $S(f)$ — спектральная плотность корреляционной функции; N — число выборок в f ; $\Delta f = 1/N$ — интервал выборки; $f_k = k\Delta f$ — значение выбранного f ; ϕ_k — независимая случайная величина, равномерно распределенная между 0 и 2π .

На рис. 15—19 приведены рассчитанные и аналитические корреляционные функции для приращений модельного FBM для разных H .

Корреляционные функции рассчитываются по алгоритму

$$\text{Cov}(r) = \sum_{m=1}^{NN} [W_H^m(0) - W_{H_0}(0)] [W_H^m(r) - W_{H_0}(r)] / NN,$$

где NN — число реализаций.

Здесь величины с нулевым индексом — выборочные средние по всему ансамблю реализаций.

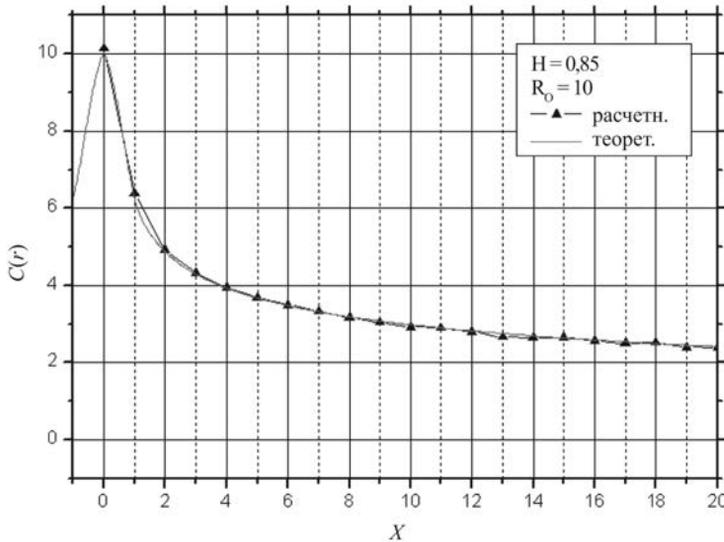


Рис. 15. Аналитическая и модельная ковариация приращений FBM. $H = 0,85$

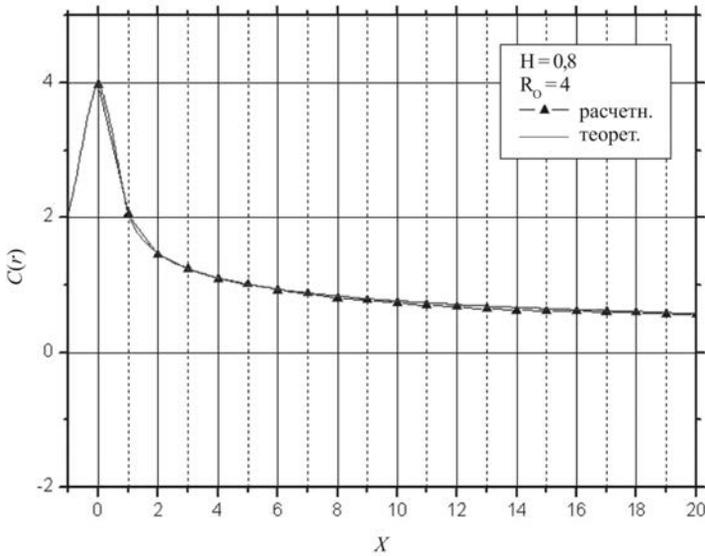


Рис. 16. Аналитическая и модельная ковариация приращений FBM. $H = 0,8$

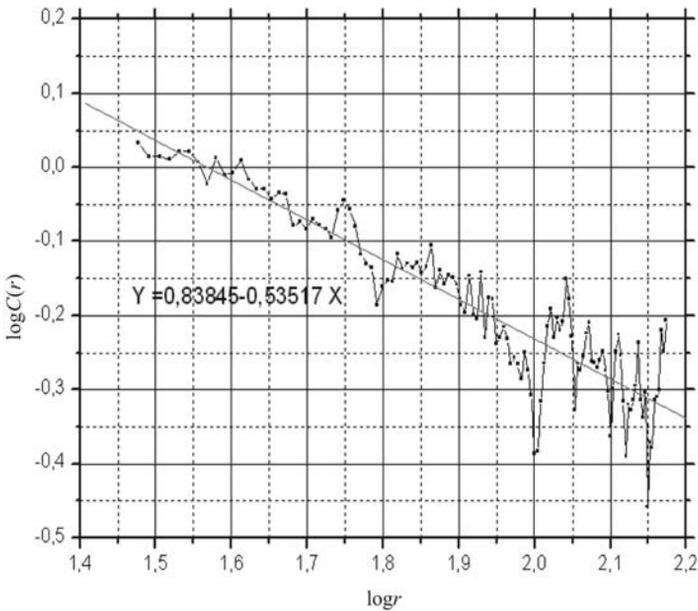


Рис. 17. Ковариация приращений FBM. $H = 0,8$ на хвостах.
Прямая линия — степенная функция

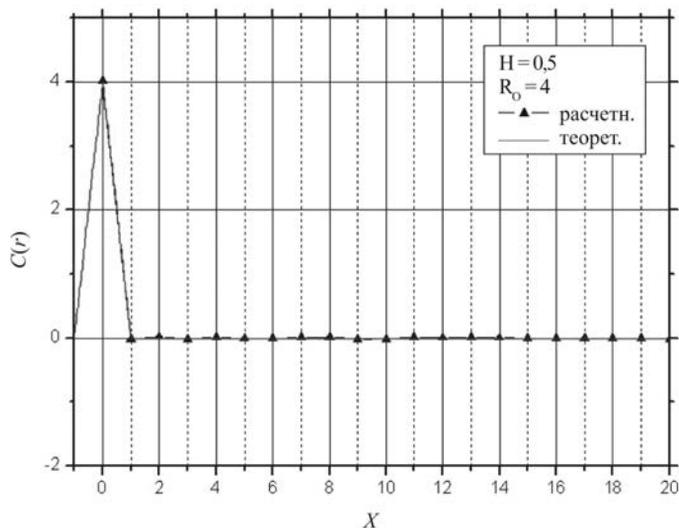


Рис. 18. Ковариация приращений FBM, при $H = 0,5$ в соседних точках отсутствует

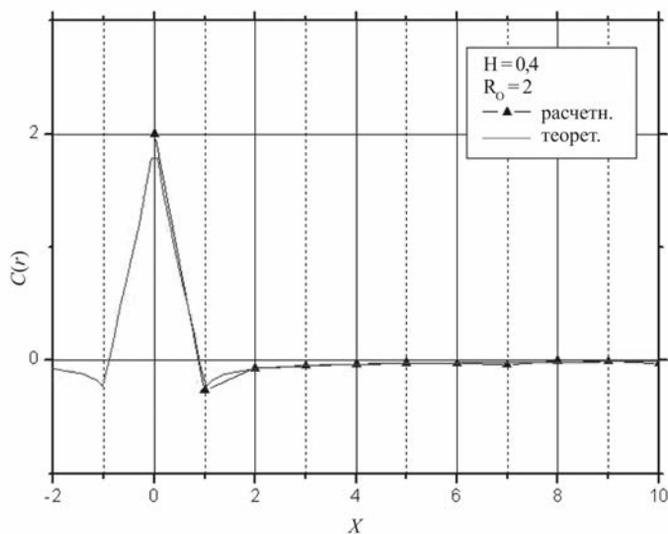


Рис. 19. Аналитическая и модельная ковариация приращений FBM, $H = 0,4$. Ковариация в соседних точках отрицательная

Отметим, что ковариация приращений для FBM для значений H , приближающихся к единице, имеет очень тяжелые степенные хвосты (рис. 15—17).

3.2. Двумерные модели FBM

Разработанный алгоритм использован для построения одномерных и двумерных стохастических моделей распространения примеси (фрактальных броуновских движений с коррелированными приращениями).

На первом этапе для каждой частицы моделируется два фрактальных броуновских процесса длиной N (с необходимым количеством шагов по времени). Процессы $B_H(x)$ и $B_H(\tau x) / \tau^H$ (где τ — константа) статистически идентичны. Поэтому на втором этапе производится перенормировка исходя из реального шага по времени τ . Параметры r_0, H у этих двух процессов могут быть разными.

Первый процесс характеризует x -ю координату центра частицы примеси в момент τk ($1 \leq k \leq N$), второй процесс — y -ю координату центра частицы в тот же момент времени. Концентрация примеси в момент τk ($1 \leq k \leq N$) определяется на двумерной эйлеровой сетке. Каждая частица имеет одинаковую массу, равномерно распределенную по площади частицы (так называемая крупная частица). Это связано с тем, что конечный размер частицы позволяет использовать меньшее количество частиц для получения решения без сильных нефизических осцилляций, связанных со стохастичностью процесса.

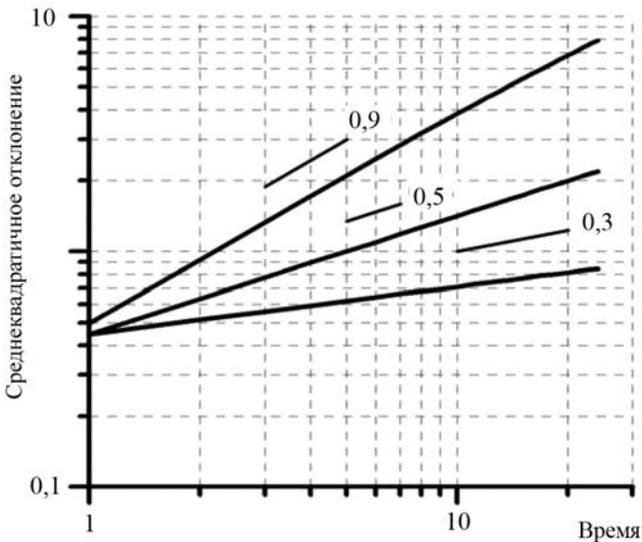


Рис. 20. Дисперсия частиц в двумерной модели FBM в зависимости от времени для разных параметров Харста

На рис. 20 приведена дисперсия местоположения частиц в зависимости от времени для разных параметров Харста. Считается, что процессы по разным направлениям идентичны. Легко убедиться, что в зависимости от параметра Харста двумерная модель для дисперсии частиц показывает однозначно степенную зависимость, причем показатель степени, как и в данных лабораторных наблюдений и экспериментов, варьируется от субдиффузии ($\alpha = 0,3$) до супердиффузии ($\alpha = 0,9$).

4. Модели случайных неоднородных и трещиноватых сред для прямого моделирования процессов просачивания и распространения трассеров

Как уже указывалось, важнейшим с точки зрения водопроницаемости свойством сети трещин в неоднородных породах является их связность. Этот факт дает основание считать, что теория фильтрации через сеть трещин должна включать описание этой сети. Построение сети трещин — довольно сложная задача. Существуют два основных подхода — построение неоднородного поля проводимости и использование перколяционных сред, где фактически имеются только две проводимости.

Разработанный алгоритм FBM использован для моделирования двумерной фрактальной трещиноватой среды по типу перколяционной, но имеющей существенные отличия. Главное из них — проводимость в соседних ячейках не независимая, как в классической перколяционной среде, а скоррелированная.

Относительная проводимость на ребрах расчетной ячейки условно полагается равной 0 или 1 (можно выбрать и другие сильно различающиеся по проводимости величины). Начиная с верхней границы для каждого вертикального ряда расчетных ячеек разыгрывается FBM. Аналогично для каждого горизонтального ряда расчетных ячеек разыгрывается другой FBM (возможно, с другими параметрами r_0 , H). Поскольку приращения в FBM скоррелированы, возникновение положительного приращения в стохастическом смысле опять влечет за собой положительное приращение на масштабах корреляционной длины, и наоборот, отрицательное приращение влечет за собой отрицательное приращение на масштабах корреляционной длины. Будем считать ребро расчетной ячейки проводящим (относительная проводимость 1), если приращение положительное, и не проводящим (относительная проводимость 0), если приращение отрицательное. Кроме того, для случаев, когда математическое ожидание проводимости случайной среды не совпадает с полусуммой контрастной проводимости, предусмотрена модификация. Вводится контрольное значение, и если

приращение больше этого контрольного значения, то проводимость считается равной 1, если меньше — полагается равной 0.

Этот алгоритм построения неоднородной среды совпадает с обычной перколяционной средой для случая $H = 0,5$, когда ребра расчетных ячеек считаются проводящими или непроводящими независимо друг от друга.

Некоторые примеры случайных полей проводимости, построенные по этому алгоритму, приведены на рис. 21 и 22. Использована специальная программа визуализации. На рис. 21 в вертикальном направлении $r_0 = 500$, $H = 0,8$, в горизонтальном направлении $r_0 = 500$, $H = 0,5$. На рис. 22 в вертикальном направлении $r_0 = 50$, $H = 0,3$, в горизонтальном направлении $r_0 = 200$, $H = 0,82$.

Прослежены сквозные пути, связывающие верхний ряд ячеек с остальными в предположении, что если на ребре ячейки значение проводимости 0 — связь между этими ячейками через это ребро считается отсутствующей. Для $H = 0,8$ корреляционная функция положительна для всех расстояний со степенной асимптотикой на хвостах. Для $H = 0,3$ корреляционная функция отрицательна для всех расстояний, тоже со степенной асимптотикой на хвостах. Нетрудно убедиться, что по этой причине характер путей проводимости совершенно разный. В первом случае имеются достаточно узкие, но длинные проводящие пути, во втором — достаточно широкие пути, но ни один не доходит до нижней границы области.

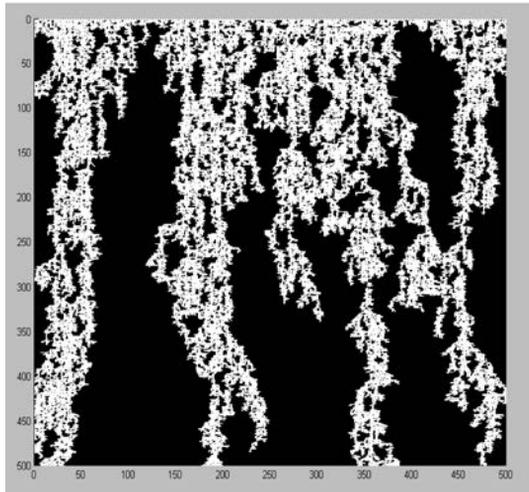


Рис. 21. Связанная сеть трещин (учитывается связанность только по вертикали вниз и по горизонтали). $r_0 = 500$, $H = 0,8$

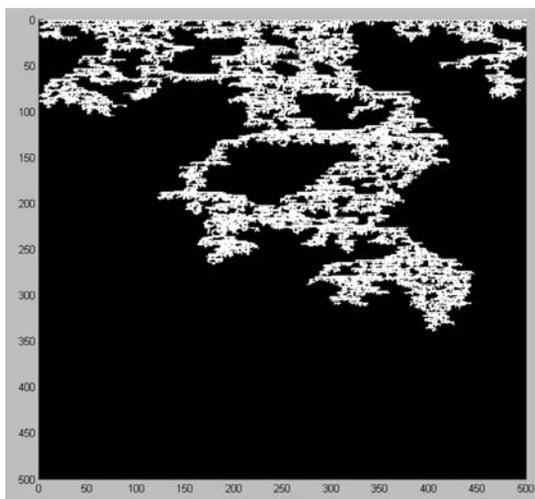


Рис. 22. Связанная сеть трещин (учитывается связанность только по вертикали вниз и по горизонтали). $r_0 = 50$, $H = 0$

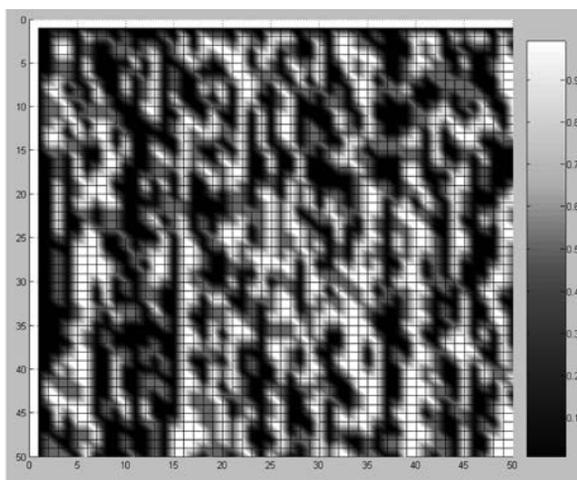


Рис. 23. Усредненное поле проводимости

На рис. 23 приведен пример более простой визуализации полей проводимости. Рассмотрен случай $H = 0,8$ в вертикальном направлении и $H = 0,3$ в горизонтальном. Представлены оценки для проводимости в центрах расчетных ячеек, когда она определяется как четверть суммы зна-

чений на середине граней. При этом конфигурация трещин слегка размывается. Однако, даже несмотря на это, прослеживается общая тенденция к формированию трещин с общей ориентацией в среднем вертикальном направлении. Отметим, что для классической перколяционной среды ($H = 0,5$), когда проводимость на соседних ребрах нескоррелирована, ничего похожего наблюдать невозможно.

5. Сравнение результатов использования двумерных стохастических моделей с тяжелыми хвостами в распределениях FLM и натурального эксперимента MADE

Крупномасштабные эксперименты, проведенные в натуральных условиях [18; 19], показали, что распространение радиоактивных трассеров происходило никоим образом не похоже на закон Фике. Условия экспериментов таковы, что почва в водоносном слое состояла из смеси гравия и песка, кроме того, содержала глину. Эта среда чрезвычайно гетерогенна с большим разбросом значений проходимости по пространству.

В ходе натурального эксперимента вводили воду, которая содержала одновременно различные трассеры, в том числе практически консервативные радиоактивные трассеры. Наблюдения продолжались в различных экспериментах более года. Дисперсия примеси происходила главным образом в горизонтальном направлении с незначительной вертикальной протяженностью.

Для моделирования поведения примеси в этих экспериментах с успехом использовались одномерные уравнения с дробной пространственной производной [11; 21—30]. В этих работах при сравнении модельных результатов и данных измерений последние усреднялись по глубине и поперек направления основного потока (в распоряжении авторов имелась только одномерная модель дробной диффузии). Результаты моделирования для усредненных поперек потока и по глубине концентраций трассера прекрасно ложились на экспериментальные данные. Однако не было возможности моделировать реальные двумерные особенности процесса при помощи моделей такого типа, поскольку процесс был существенно асимметричен, а для такого случая не существовало реализованных алгоритмов решения двумерного уравнения дробной диффузии.

Нами была использована разработанная двумерная модель FLM. Это позволило более детально проследить за характерными особенностями процесса и сравнить их с данными наблюдений. На рис. 24 показаны результаты моделирования и данные измерений. Представлено расстояние от

источника, где наблюдались максимальные концентрации. Так как профили концентрации трассеров в экспериментах существенно неоднородны даже в направлении основного дрейфа (сильная скошенность, медленное степенное падение концентраций на больших расстояниях от источника), рассчитаны местоположение центра масс плюма и соответствующие данные по обработке измерений (центр массы определен как

$$X_c(t) = \frac{\int c(x, t) x dx}{\int c(x, t) dx}, \text{ где } c(x, t) \text{ — осредненная поперек потока концен-}$$

трация, x — координата вдоль осредненного потока).

На рис. 25 представлены максимальные концентрации по всей горизонтальной плоскости распространения, усредненные по глубине, в зависимости от времени (модельные результаты и данные измерений). Для сравнения приведены также абсолютные значения наблюдаемых абсолютных максимумов без осреднения по вертикали. Как в модельных, так и в экспериментальных данных наблюдается характерная степенная зависимость.

Была выбрана средняя скорость смещения, равная 0,22 м/сут согласно оценкам в [18; 19]. Величина $\gamma_1 = \frac{1}{\alpha_1} \approx 0,9$ для продольного направления

(вдоль следа) и $\gamma_2 = \frac{1}{\alpha_2} \approx 0,6$ для поперечного направления; коэффициенты скошенности — $\beta_1 = 1$ (полная асимметрия) для продольного направления и $\beta_1 = 0,5$ (симметричный случай) для поперечного направления; значение коэффициента диффузии $A = 0,03$ для обоих направлений.

На рис. 25 показана концентрация на оси следа трассера в разное время (эксперимент MADE-1). Незакрашенные квадратные маркеры соответствуют измеренным значениям концентраций на оси следа, усредненным по вертикальному направлению. Незакрашенные круглые маркеры — наблюдаемые абсолютные максимальные значения концентрации трассера на оси следа. Темные круглые маркеры — то же самое, рассчитанное по двумерной модели случайных блужданий с тяжелыми хвостами в распределениях FLM. В наших вычислениях лучшие результаты (наибольшее соответствие данным наблюдения) были для $\alpha_1 = 1,1$,

$\gamma_1 = \frac{1}{\alpha_1} \approx 0,9$ для продольного направления и $\alpha_2 = 1,8$, $\gamma_2 = \frac{1}{\alpha_2} \approx 0,6$ для поперечного направления.

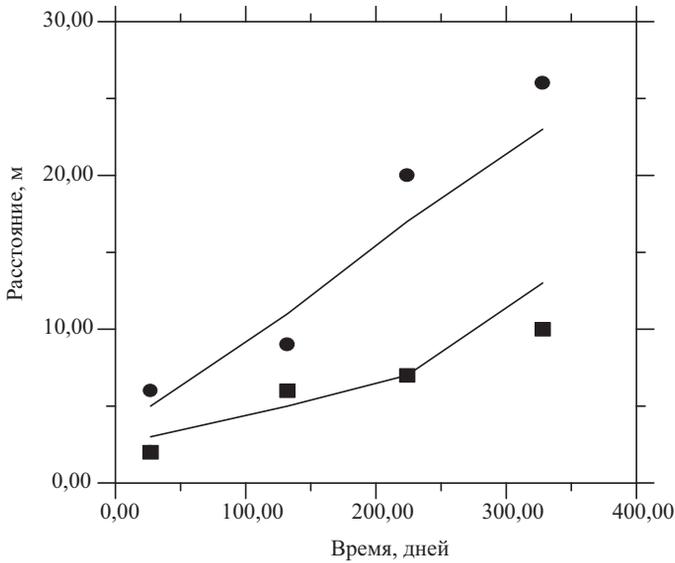


Рис. 24. Результаты эксперимента MADE-2 и двумерной стохастической модели. Положение пика концентрации (максимум, квадратные маркеры) и центра масс (среднее, кружки) в различные моменты времени. Непрерывная прямая отображает двумерную стохастическую модель, маркеры — наблюдаемые в эксперименте данные

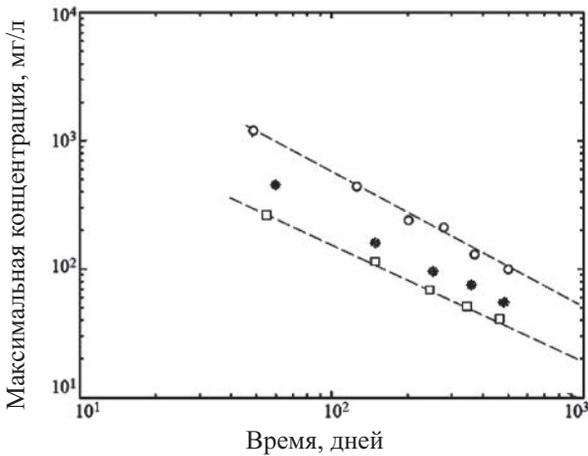


Рис. 25. Результаты эксперимента MADE-1 и двумерной стохастической модели случайных блужданий FLM

6. Заключение

Результаты лабораторных и полевых экспериментов показывают, что для сильнонеоднородных неупорядоченных сред, какими являются трещиноватые горные породы, неклассический характер переноса представляется скорее правилом, чем исключением. Причиной аномальных режимов переноса в данном случае является сложная неоднородная структура натуральных сетей трещин, которые, как показывают наблюдения, проявляют фрактальные свойства.

В предположении, что стохастические процессы перемещения загрязнения или трассера в сети фрактальных трещин тоже имеют фрактальный характер, разработаны два разных типа стохастических моделей фрактальных блужданий частиц (CTRM).

Это в некотором смысле простейшие математические модели переноса в сильнонеоднородных средах, характеризующихся отсутствием пространственного масштаба, в которых среда представляется однородной, а ее стохастические свойства проявляются в выборе функции распределения приращений координат блуждающей частицы. Если приращения координат происходят через равные промежутки времени и функция приращений имеет конечную дисперсию, то изменение со временем плотности пространственного распределения частиц описывается классическим уравнением диффузии.

Если дисперсия приращений координат становится бесконечной, то в одномерном случае средняя плотность описывается уравнением дробной диффузии с оператором дробного пространственного дифференцирования, определяемым двумя параметрами, характеризующими функцию распределения. Это параметр α , задающий степенное убывание тяжелых хвостов, и параметр β , задающий степень асимметрии распределения.

При $\alpha = 2$ распределение стремится к нормальному, при $\alpha = 1$ переходит в распределение Коши. При $\alpha < 1$ функция распределения приращений координат блуждающей частицы характеризуется не только бесконечной дисперсией, но и бесконечно большой средней величиной. И хотя в этом случае мы не можем получить устойчивых средних для каждой из частиц в отдельности, средние значения плотности частиц в заданной точке пространства остаются устойчивыми переменными и имеют привычный физический смысл.

Моделирование распространения примеси на основе уравнений дробной диффузии в многомерном случае и при наличии асимметрии в параметрах диффузии встречается с заметными трудностями (до настоящего времени не реализовано на практике). Стохастический подход — более гибкий и прозрачный инструмент для моделирования процессов с неограниченной дисперсией. Но и здесь существуют определенные трудности. Они связаны с созданием генераторов случайных величин с нужными свойствами. Однако с вычислительной точки зрения метод прямого статистического мо-

делирования распространения консервативной примеси в сильнонеоднородных средах СТМ в случае более одного пространственного измерения имеет заметные преимущества перед методом численного решения уравнений дробной диффузии. Кроме того, указанный метод отличается большей гибкостью с точки зрения возможностей учета дополнительных физических факторов, таких, например, как анизотропия, обуславливаемая наличием силы тяжести.

В данной работе предложен и опробован один из возможных вариантов генератора случайных величин с тяжелыми хвостами в распределениях для всего диапазона изменчивости параметров таких распределений (генератор относится к классу так называемых аппроксимационных, основанных на использовании центральной предельной теоремы Гнеденко—Леви). На основе этого генератора разработаны одномерная, двумерная и трехмерная стохастические модели распространения примеси, для которой характерна неограниченность дисперсии местоположения частиц примеси при разных реализациях процесса. Приведены результаты использования таких моделей для описания реальных процессов.

Разработан другой класс стохастических моделей фрактальных блужданий, так называемые модели Fractal Brownian Motion с коррелированными приращениями во времени. Эти процессы соответствуют широкому классу результатов, полученных в лабораторных условиях аномальной дисперсии (как субдиффузии, так и супердиффузии).

Проведено сравнение смоделированной корреляционной функции с теоретической, которое показало высокую точность алгоритма и степенную зависимость корреляционной функции на концах. На основе этой модели разработан аккуратный алгоритм построения нестационарного процесса со скоррелированными приращениями как по пространству, так и по времени.

Разработан алгоритм для моделирования двумерной фрактальной трещиноватой среды. В отличие от перколяционной среды в этой модели соседние по пространству (на расчетной сетке) проводимости не независимы между собой, а скоррелированы, следовательно, алгоритм позволяет строить анизотропные среды в разных направлениях (по горизонтали и вертикали).

Литература

1. *Sahimi M.* Flow and transport in porous media and fractured rock: from classical methods to modern approaches. — Weinheim, Germany: VCH, 1995.
2. Rock fractures and fluid flow: contemporary understanding and applications / National Research Council. — Washington, DC: National Academy Press, 1996.
3. Dynamics of fluids in fractured rocks / Ed. by B. Faybishenko, P. A. Witherspoon, S. M. Benson. — [S. l.], 2000. — (AGU geophysical monograph series; Vol. 122).

4. *Neuman S. P., Di Federico V.* Multifaceted Nature of Hydrogeologic Scaling and its Interpretation // *Rev. of Geophysics*. — 2003. — Vol. 41. — P. 1014.
5. *Glimm J., Sharp D. H.* A random field model for anomalous diffusion in heterogeneous porous media // *J. Stat. Phys.* — 1991. — Vol. 62. — P. 415—425.
6. *Uchaikin V. V., Gusarov G. G.* Levy flight applied to random media problems // *J. Math. Phys.* — 1997. — Vol. 38. — P. 2453—2464.
7. *Isichenko M. B.* Percolation, statistical topography and transport in random media // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — Vol. 64, № 4. — P. 961—1043.
8. *Bouchard J. P.* More Levy distribution physics // *Levy flights and related topics in Physics*. — Berlin: Springer, 1995. — P. 239—250.
9. *Bouchard J. P., Georges A.* Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanics, model and physical application // *Phys. Rep.* — 1990. — Vol. 195. — P. 127—293.
10. *Klafter J., Shlesinger M. F., Zumofen G.* Beyond Brownian motion // *Physics Today*. — 1996. — Feb. — P. 33—39.
11. *Shlesinger M. F., Klafter J., Wong Y. M.* Random walks with infinite spatial and temporal moments // *J. Stat. Phys.* — 1982. — Vol. 27. — P. 499—512.
12. *Shlesinger M. F., Zaslavsky G. M., Klafter J.* Strange kinetics // *Nature*. — 1993. — Vol. 336. — P. 31—37.
13. *Zhang A., Benson D. A., Meerchaert M.* et al. On using random walk approximation to solve the space fractional advection dispersion equations // *J. Statistical Physics*. — 2006. — Vol. 123, № 1. — P. 89—110.
14. *Matheron G., De Marsily G.* Is transport in porous media always diffusive? A Counterexample // *Water Resour. Res.* — 1980. — Vol. 16. — P. 901—917.
15. *Lenormand R., Wang B.* A stream tube model for miscible flow // *Transp. Porous Media*. — 1995. — Vol. 18. — P. 263.
16. *Bolshov L., Kondratenko P., Pruess K., Semenov V.* Non-classical Transport Processes in Geologic Media: Review of Field and Laboratory Observations and Basic Physical Concepts // *Vadose Zone J.* — 2008. — Vol. 7, № 4. — P. 1181—1190.
17. *LeBlanc D. H., Garabedian S. P., Hess K. M.* et al. Large scale natural gradient test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts, 1, Experimental design and observed tracer movement // *Water Resour. Res.* — 1999. — Vol. 27, № 5. — P. 895—910.
18. *Adams E. E., Gellar L. W.* Field study of dispersion in heterogeneous aquifer. 2: Spatial moments analysis // *Water Resour. Res.* — 1992. — Vol. 28, № 12. — P. 3293—3307.
19. *Boggs J. M., Beard L. M., Long S. E., McGee M. P.* Database of the second macrodispersion experiment (MADE-2) / *Electric Power Res. Inst.* — Palo Alto, Ca., 1993. — (EPRI report TR-102072).
20. *Meerschaert M., Benson D. A., Baumer B.* Operator Levy motion and multiscaling anomalous diffusion // *Phys. Rev.* — 2001. — Vol. 63. — P. 1112—1117.

21. *Benson D. A., Shumer R., Meerschaert M., Wheatcraft S. V.* Fractional dispersion, Levy motion, and the MADE tracer tests // *Transport in porous media*. — 2001. — Vol. 42. — P. 211—240.
22. *Saichev A. I., Zaslavsky G. M.* Fractional kinetic equations: Solutions and applications // *J. Chaos*. — 1997. — Vol. 7. — P. 753—764.
23. *Montroll E. W., Weiss G. H.* Random walks on lattices // *J. Mathematical Phys.* — 1965. — Vol. 6. — P. 167—181.
24. *Schumer, R., Benson D. A., Meerschaert M., Wheatcraft S.* Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation // *J. Contaminant Hydrology*. — 2001. — Vol. 48. — P. 69—88.
25. *Benson D. A.* The Fractional Advection-Dispersion Equation: Development and Application: A dissertation submitted in partial fulfillment of the Doctor of Philosophy in Hydrogeology / Univ. of Nevada. — [S. l.], 1998.
26. *Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И.* Интегралы и дробные производные и некоторые их применения. — Минск: Наука и техника, 1987.
27. *Головизнин В. М., Киселев В. П., Юрков Ю. И.* Некоторые особенности вычислительного алгоритма для уравнения дробной диффузии. — М., 2002. — (Препринт / ИБРАЭ РАН; IBRAE-2002-01).
28. *Головизнин В. М., Короткин И. А.* Численные методы решения уравнения дробной диффузии в одномерном случае. — М., 2002. — (Препринт / ИБРАЭ РАН; IBRAE-2002-10).
29. *Головизнин В. М., Сороковикова О. С., Мелькина М. А., Короткин И. А.* Стохастическая модель распространения примеси в трещиноватой и сильно неоднородной среде. — М., 2005. — (Препринт / ИБРАЭ РАН; IBRAE-2005-02).
30. *Mainardi F.* Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics // *CISM Courses and Lectures* / Eds. A. Carpinteri and F. Mainardi. — Wien: Springer-Verl., 1997. — P. 291—348.
31. *Benson D., Meerschaert M. M., Wheatcraft W.* Application of a fractional advection-dispersion equation // *Water Resour. Res.* — 2000. — Vol. 36, № 6. — P. 1403—1412.
32. *Uchaikin V. V., Zolotarev V. M.* Chance and stable distribution and their applications: Monograph. — [S. l.]: VSP Intern. Science Publ., 1999. — 594 p.
33. *Kanter M.* Stable densities under change of scale and total variation inequalities: Ann. variables // *J. Amer. Statist. Assoc.* — 1975. — Vol. 71. — P. 340—344.
34. *Odling N. E.* Scaling and connectivity of joint systems in sandstone from western Norway // *J. Struct Geol.* — 1997. — Vol. 19. — P. 563—571.
35. *Goloviznin V. M., Korotkin I. A., Pruss K.* et al. Stochastic models of Solute transport in highly heterogeneous geologic media // *Vadose Zone J.* — 2008. — Vol. 8, № 4. — P. 1207—1217.
36. *Barker J. A.* A generalized radial flow model for hydraulic tests in fractured rock // *Water Resources Research*. — 1988. — Vol. 24, № 10. — P. 1796—1804.

37. *Riemann K., Van Tonder G.* Interpretation of single-well tracer tests using fractional-flow dimensions. Pt. 2: A case study // *Hydrogeology J.* — 2002. — Vol. 10. — P. 357—367.
38. *Feller W.* An introduction to probability theory and its application. — Vol. 2. — New York: John Wiley & Sons, 1971.
39. *Chambers J. M., Mallows C. I., Cruck B. W.* A method for simulation of stable random variables // *J. Am. Stat. Assoc.* — 1976. — Vol. 71. — P. 340—344.
40. *Mantegna R. N.* Fast accurate algorithm for numerical simulation of Levy stable processes // *Phys. Rev. E.* — 1994. — Vol. 49. — P. 4677—4683.
41. *Zhang A., Benson D. A., Meerchaert M., Scheffer H. P.* Random walk approximation of fractional-order multiscaling anomalous diffusion // *Phys. Rev. E.* — 2006. — Vol. 74. — P. 026706.
42. *Diethelm K.* An Algorithm for Numerical Solution of Differential Equations of Fractional Order // *Electronic Transaction on Numerical Analysis.* — 1997. — Vol. 5, March. — P. 1—6.
43. *Diethelm K., Freed A. D.* The FracPECE Subroutine for the Numerical Solution of Differential Equation of Fractional Order // *Forschung und wissenschaftliches Rechnen: Beiträge zum Heinz-Billing-Preis / S. Heinzel, T. Plesser (eds.); Gesellschaft für wissenschaftliche Datenverarbeitung.* — Göttingen, 1999. — P. 57—71.
44. *Blank L.* Numerical treatment of differential equations of fractional order. — [S. l.], 1966. — (Manchester Center for computational Mathematics / Numerical Analysis Report; 287).
45. *Gorenflo R., Mainardi F.* Essentials of Fractional Calculus. — [S. l.], 2000. — (Preprint submitted to MaPhySto Center, preliminary version; 28 January).
46. *Yin Z. M.* New method for simulation of fractional brownian motion / *Pacific geosince centre.* — [S. l.], 1996.
47. *Stauffer D., Aharony A.* Introduction to percolation Theory. — London: Taylor & Francis, 1992.
48. *Федер Е.* Фракталы: Пер. с англ. — М.: Мир, 1991. — 254 с.

Научное издание

ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ ПРОБЛЕМЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ ТУРБУЛЕНТНЫХ И ДВУХФАЗНЫХ ТЕЧЕНИЙ

Том 1
ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

*Утверждено к печати Ученым советом
Института проблем безопасного развития атомной энергетики
Российской академии наук*

Редактор *А. И. Иоффе*

Издательство «Наука»
117997, Москва, Профсоюзная ул., 90
Зав. редакцией *М. В. Грачева*
Редактор издательства *Л. В. Филиппова*

Оригинал-макет подготовлен 000 «Комтехпринт»
Иллюстрации приведены в авторской редакции

Формат 60×90 ¹/₁₆. Бумага офсетная 80 г/м²
Печать офсетная. Гарнитура «Оффицина»
Уч.-изд. л. 20,5. Заказ 20922

Заказное

Отпечатано с готовых диапозитивов типографией 000 «Инфолио-Принт»