

МЕТОД РЕНОРМАЛИЗАЦИОННОЙ ГРУППЫ В ЗАДАЧЕ ПЕРЕНОСА ПРИ НАЛИЧИИ НЕЛИНЕЙНЫХ ИСТОЧНИКОВ И СТОКОВ

Э. В. Теодорович*

*Институт проблем механики Российской академии наук
117526, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 7 сентября 1998 г.

Рассматривается задача о диффузионном расплывании локализованного распределения при наличии нелинейных источников и стоков, моделирующих процессы уничтожения и рождения вещества в химических реакциях. В предположении о самоподобии функции распределения при различных временах исследуются законы эволюции характерных параметров задачи — амплитуды и радиуса распределения. Для нахождения этих зависимостей применяется метод ренормализационной группы с использованием перенормировки коэффициента диффузии и полного количества вещества. В результате появляется возможность классифицировать различные режимы асимптотического поведения системы при больших временах в зависимости от знака константы нелинейного взаимодействия и размерности пространства. В частности, сформулированы условия, при которых реализуется режим асимптотической свободы или режим с обострением. Применение метода ренормализационной группы позволяет не только найти показатели степенного поведения, но также проследить выход на асимптотический режим и определить числовые коэффициенты.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование явлений переноса при наличии нелинейных источников и стоков в течение длительного времени является актуальной проблемой в связи с ее многочисленными приложениями в физике, химии, технологии, биологии, экологии и других областях знаний. В основе описания этих явлений лежит квазилинейное параболическое уравнение вида

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D_0 \Delta \right] C(\mathbf{r}, t) + \lambda C^{1+2\delta}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (1.1)$$

В частности, уравнение (1.1) возникает при моделировании процессов химической кинетики, коагуляции аэрозольных частиц, фильтрации в пористых средах, теплопереноса с учетом радиационных потерь или радиационного разогрева и проч. В дальнейшем для конкретности будем относить наше рассмотрение к химической кинетике [1] и соответственно будем называть $C(\mathbf{r}, t)$ концентрацией вещества, D_0 — коэффициентом молекулярной диффузии, $n = 1 + 2\delta$ — порядком химической реакции и λ — константой скорости реакции. Случаю $\lambda > 0$ соответствует уничтожение вещества в процессе реакции, а случаю $\lambda < 0$ — рождение вещества. При исследовании асимптотики решений при больших временах для реакций поглощения было показано, что существует

*E-mail: teodor@ipmnet.ru

некоторая критическая размерность пространства $d_c = 1/\delta$, выше которой диффузионные процессы оказываются несущественными, временная зависимость решения зависит от порядка химической реакции согласно соотношению $C(r, t) \propto (\lambda t)^{-1/2\delta}$ и не зависит от начальной концентрации вещества, что соответствует поведению в приближении среднего поля. Однако при размерности ниже критической, $d < d_c$, реализуется некоторый нелинейный режим и концентрация асимптотически убывает с течением времени по закону $C(r, t) \propto t^{-d/2}$, что указывает на доминирующую роль пространственных флуктуаций концентрации. Удобным способом исследования флуктуаций в системе с бесконечным числом существенных степеней свободы является применение методов квантовой теории поля. Согласно формализму «удвоения полей» Мартина—Сиджиа—Роуза [2], описываемая уравнением (1.1) классическая система эквивалентна некоторой квантовой системе в том смысле, что оказываются одинаковыми их характеристические функционалы (функциональные фурье-образы отождествляемой с концентрацией плотности вероятности), записанные в форме интегралов по траекториям от двух полей, представляющих собой операторы рождения и уничтожения участвующих в реакции частиц [3].

Заимствованная из квантовой теории поля техника перенормированной теории возмущений впервые была использована для исследования системы (1.1) Дои [4]. В работе [3] было показано, что для реакций бинарного типа ($n = 2$, $\delta = 1/2$) можно просуммировать ряд теории возмущений, осуществить точную перенормировку пропагатора и вершины и найти значение показателя степенной зависимости от времени, справедливое во всех порядках теории возмущений. Идея использования метода ренормализационной группы (РГ) для суммирования бесконечного ряда теории возмущений была предложена и использована в работе [5]. Была рассмотрена задача об эволюции заданного начального распределения для случая $d < d_c$, и в предположении, что асимптотика не зависит от начального распределения, был получен закон затухания с показателем $-d/2$. Как и в [3], автором работы [5] рассматривалась только перенормировка скоростей реакции (вершин), а перенормировки амплитуд полей не требовалось. Применение метода РГ позволило не только определить показатели степенного поведения, но также найти значения амплитудных числовых коэффициентов и проследить выход на асимптотический режим. В работе [6] было выполнено обобщение рассмотрения на случай произвольного порядка реакции (в отличие от рассматривавшихся ранее только реакций бинарного типа) и также были вычислены амплитудные числовые коэффициенты.

Ниже мы предлагаем несколько отличный способ применения метода РГ для исследования асимптотики начального распределения, который позволяет осуществить аналитическое продолжение не только по размерности пространства, но и по показателю порядка химической реакции. При полевом подходе это осуществить довольно трудно, поскольку порядок реакции определяет топологическую структуру фейнмановских диаграмм. Кроме того, если не использовать формализм квантовой теории поля, когда структура лагранжиана для случаев реакций порождения и уничтожения вещества оказывается различной, то в нашем подходе эти процессы описываются единообразным образом, и все различие сводится только к различию в знаке константы скорости реакции λ .

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ПОСТРОЕНИЕ ПЕРЕНОРМИРОВАННОЙ ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ

Целью работы является исследование асимптотики решений задачи Коши для локализованного начального распределения. Предполагается, что решение является автомодельным, т. е. функциональная структура решения в процессе эволюции остается неизменной и зависимость от времени сводится к изменению характерных масштабов задачи — амплитуды распределения и его ширины. В случае сферически-симметричных начальных условий из условия автомодельности следует

$$C(\mathbf{r}, t) = C(t)F(r^2/l^2(t)), \quad (2.1)$$

и знание функций $C(t)$ и $l^2(t)$ позволяет проследить эволюцию решения. (Следует отметить, что предшествующие рассмотрения данной задачи ограничивались случаем $l^2(t) = 4D_0t$ [7, 8].) Для нахождения этих функций в работе автора [9] было предложено использовать метод РГ и был рассмотрен частный случай реакции поглощения при малой размерности пространства. Ниже подобное рассмотрение обобщается на случай пространства произвольной размерности и произвольного знака λ , что позволяет единообразно исследовать также процессы, соответствующие реакциям с рождением вещества, и часто возникающие при этом так называемые режимы с обострением [8].

В дальнейшем вместо функций $C(t)$ и $l^2(t)$ будем использовать выражаемые через них полное количество вещества $q(t)$ и определяемый соотношением $l^2(t) = 4\tilde{D}(t)t$ и зависящий от времени эффективный коэффициент диффузии \tilde{D} , записав решение в виде

$$C(\mathbf{r}, t) = \frac{q(t)}{[4\tilde{D}(t)t]^{d/2}b_1} F\left(\frac{r^2}{4\tilde{D}(t)t}\right), \quad b_1 = \int dx F(x^2), \quad (2.2)$$

при этом

$$\int d\mathbf{r} C(\mathbf{r}, t) = q(t),$$

$$\int d\mathbf{r} r^2 C(\mathbf{r}, t) = 4q(t)\tilde{D}(t)t \frac{b_1}{b_2}, \quad b_2 = \int dx x^2 F(x^2). \quad (2.3)$$

Численный анализ решения показывает [10], что для большой совокупности различных начальных распределений, по крайней мере для случая реакций поглощения ($\lambda > 0$), его асимптотика хорошо описывается гауссовой кривой $F(x^2) = \exp\{-x^2\}$. В этом случае $b_1 = \pi^{d/2}$, $b_2/b_1 = d/2$.

В качестве начального распределения примем

$$C(\mathbf{r}, 0) = Q_0 \delta(\mathbf{r}). \quad (2.4)$$

Однако в ряде случаев использование обобщенной функции в качестве начального распределения может оказаться некорректным, поскольку функция $\delta^n(\mathbf{r})$ плохо определена, и тогда следует использовать регуляризованное распределение вида

$$C(\mathbf{r}, 0) = C_0 \exp(-r^2/l_0^2), \quad (2.4')$$

которое можно рассматривать как результат линейной эволюции распределения (2.4), заданного в момент времени $t = -t_0$, при этом $t_0 = l_0^2/4D_0$, $Q_0 = (\pi l_0^2)^{d/2} C_0$.

Метод РГ в его квантово-полевой формулировке основывается на наличии произвола в разбиении полного гамильтониана системы на невозмущенную часть и возмущение при построении перенормированной теории возмущений (ренормализационная инвариантность) и использовании этого произвола для улучшения теории возмущений путем суммирования некоторой бесконечной подпоследовательности полного ряда [11]. Хотя при нашем подходе понятие гамильтониана не используется и теория возмущений строится путем итерирования эквивалентных уравнениям (1.1) и (2.4) интегрального уравнения, соответствующий ренормализационной инвариантности произвол в выборе нулевого приближения имеет место.

Следуя методу РГ, выполним в уравнении (1.1) перенормировку коэффициента диффузии путем замены $D_0 \rightarrow D = Z_1^{-1} D_0$ и добавления в правую часть уравнения компенсирующего эту замену так называемого контрчлена

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta \right] C(\mathbf{r}, t) + \lambda C^{1+2\delta}(\mathbf{r}, t) = (Z_1 - 1)D\Delta C(\mathbf{r}, t). \quad (2.5)$$

С помощью функции Грина перейдем от дифференциального уравнения к интегральному, в котором начальное условие (2.4) учтено в явном виде:

$$C(\mathbf{r}, t) = Q_0 G(\mathbf{r}, t) - \int_0^t dt' \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') [\lambda C^{1+2\delta}(\mathbf{r}', t') - (Z_1 - 1)D\Delta C(\mathbf{r}', t')] \quad (2.6)$$

(отметим, что функция Грина в (2.6) построена по перенормированному значению коэффициента диффузии D , а не по исходному D_0).

Выполним перенормировку начальных условий с помощью замены $Q_0 \rightarrow Q = Z_2^{-1} Q_0$ и добавления в правую часть соответствующего второго контрчлена:

$$C(\mathbf{r}, t) = QG(\mathbf{r}, t) - \int_0^t dt' \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \times \\ \times [\lambda C^{1+2\delta}(\mathbf{r}', t') - (Z_1 - 1)D\Delta C(\mathbf{r}', t')] + (Z_2 - 1)QG(\mathbf{r}, t). \quad (2.7)$$

Последовательное итерирование уравнения (2.7) с использованием в качестве нулевого приближения первого члена правой части уравнения приводит к представлению решения в виде ряда перенормированной теории возмущений по степеням параметра нелинейности λ .

Соответствующий расчет в первом приближении теории возмущений дает [9]

$$C^{(1)}(\mathbf{r}, t) = Q \left[G(\mathbf{r}, t) - \frac{\lambda Q^{2\delta}}{D^{\delta d}} \times \right. \\ \left. \times A \int_0^t \frac{dt'}{(t')^{1-\epsilon}} G\left(\mathbf{r}, t - \frac{2\delta}{1+2\delta} t'\right) + (Z_2 - 1)G(\mathbf{r}, t) + (Z_1 - 1)Dt\Delta G(\mathbf{r}, t) \right], \quad (2.8)$$

$$\epsilon = 1 - \delta d, \quad A = \frac{1}{(1+2\delta)^{d/2}} \frac{1}{(4\pi)^{1-\epsilon}}.$$

При получении (2.8) было использовано так называемое полугрупповое свойство функции Грина уравнения диффузии, согласно которому

$$\int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') G(\mathbf{r}', t' - t_0) = G(\mathbf{r}, t - t_0) \quad (t > t' > t_0), \quad (2.9)$$

и легко проверяемое соотношение

$$G^{1+2\delta}(\mathbf{r}, t) = \frac{A}{(Dt)^{\delta d}} G\left(\mathbf{r}, \frac{t}{1+2\delta}\right). \quad (2.10)$$

Из формулы (2.8) можно видеть, что по крайней мере при $\epsilon < 0$ основной вклад в интеграл по t' дает область малых t' , что позволяет пренебречь t' в аргументе функции Грина под знаком интеграла. В результате получим, что в низшем приближении теории возмущений в главном порядке по $1/\epsilon$ картина пространственного распределения концентрации будет описываться функцией Грина линейной задачи. Тем самым подтверждается предположение (2.1) об автомодельном характере эволюции картины распределения, поскольку в отношении получаемых итерированием высших приближений теории возмущений можно привести те же соображения. Отметим также, что в случае малых δ согласно (2.8) также возникает возможность пренебречь t' в аргументе функции Грина и получить пространственное распределение, характерное для линейной задачи.

Отметим, что константы перенормировки Z_1 и Z_2 до сих пор оставались произвольными. Зафиксируем значения этих констант с помощью условия нормировки, согласно которому значения содержания вещества и эффективный коэффициент диффузии в момент времени $t = \tau$ должны совпадать с перенормированными значениями:

$$q(\tau) = Q, \quad \tilde{D}(\tau) = D. \quad (2.11)$$

Использование (2.3), (2.8) и (2.11) в низшем приближении теории возмущений приводит к следующему значению константы перенормировки полного количества вещества:

$$Z_2(\tau) = 1 + \frac{\lambda Q^{2\delta}}{D^{\delta d}} A \int_0^\tau \frac{dt'}{(t')^{1-\epsilon}} = 1 + gAB(1, \epsilon), \quad (2.12)$$

$g = (\lambda Q^{2\delta} / D^{\delta d}) \tau^\epsilon$, $B(\xi, \eta)$ — бета-функция (эйлеров интеграл первого рода). Запись (2.12) через бета-функцию связана с тем, что при отрицательных ϵ этот интеграл расходится, однако он может быть продолжен в область $\epsilon < 0$ с помощью известных рекуррентных соотношений. Подобный подход соответствует методу размерной регуляризации в квантовой теории поля [12, 13].

Аналогичным образом найдем для константы перенормировки коэффициента диффузии

$$Z_1(\tau) = 1 - \frac{\lambda Q^{2\delta}}{D^{\delta d}} A \frac{2\delta}{1+2\delta} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \frac{dt'}{(t')^{-\epsilon}} = 1 - 2gAaB(1, \epsilon), \quad (2.13)$$

$$a = \frac{\delta}{1+2\delta} \frac{B(1, 1+\epsilon)}{B(1, \epsilon)}.$$

3. РЕНОРМАЛИЗАЦИОННАЯ ИНВАРИАНТНОСТЬ И МЕТОД РЕНОРМГРУППЫ

Выразим искомые функции $q(t)$ и $\bar{D}(t)$ через безразмерные функции безразмерных параметров:

$$q(t) = Q f_2(t/\tau, g), \quad \bar{D}(t) = D f_1(t/\tau, g), \quad (3.1)$$

которые в силу условий нормировки (2.11) должны удовлетворять соотношениям $f_1(1, g) = 1$, $f_2(1, g) = 1$. Требование ренормализационной инвариантности означает, что результат вычисления величин $q(t)$ и $\bar{D}(t)$ не должен зависеть от набора числовых параметров, соответствующих конкретному выбору точки нормировки τ , т. е. при выполнении РГ-преобразований $\tau \rightarrow \tau_1$, $Q \rightarrow Q_1$, $D \rightarrow D_1$ должны иметь место соотношения

$$Q f_2\left(\frac{t}{\tau}, g\right) = Q_1 f_2\left(\frac{t}{\tau_1}, g_1\right), \quad D f_1\left(\frac{t}{\tau}, g\right) = D_1 f_1\left(\frac{t}{\tau_1}, g_1\right), \quad g_1 = \frac{\lambda Q_1^{2\delta}}{D_1^{\delta d}} \tau_1^\epsilon. \quad (3.2)$$

Из условия нормировки следует

$$Q_1 = Q f_2\left(\frac{\tau_1}{\tau}, g\right), \quad D_1 = D f_1\left(\frac{\tau_1}{\tau}, g\right),$$

что приводит к функциональным уравнениям РГ

$$f_i\left(\frac{t}{\tau}, g\right) = f_i\left(\frac{\tau_1}{\tau}, g\right) f_i\left(\frac{t}{\tau_1}, g_1\right) \quad (i = 1, 2). \quad (3.3)$$

Для решения уравнений (3.3) введем новую безразмерную функцию

$$\frac{\lambda q^{2\delta}(t) t^\epsilon}{\bar{D}^{\delta d}(t)} \equiv g f_2^{2\delta}\left(\frac{t}{\tau}, g\right) \left(\frac{t}{\tau}\right)^\epsilon / f_1^{\delta d}\left(\frac{t}{\tau}, g\right) = \bar{g}\left(\frac{t}{\tau}, g\right). \quad (3.4)$$

Эта функция является зависящим от времени фактическим параметром разложения в ряд перенормированной теории возмущений, инвариантным относительно РГ-преобразования. Она удовлетворяет функциональному уравнению РГ

$$\bar{g}(x, g) = \bar{g}(x/\alpha, \bar{g}(\alpha, g)), \quad \bar{g}(1, g) = g \quad (3.5)$$

и следующему из него дифференциальному уравнению РГ

$$\left\{ -x \frac{\partial}{\partial x} + \beta(g) \frac{\partial}{\partial g} \right\} \bar{g}(x, g) = 0, \quad \beta(g) = \frac{\partial \bar{g}(x, g)}{\partial x} \Big|_{x=1}. \quad (3.6)$$

В действительности формулу (3.6) можно рассматривать как уравнение только в случае, когда задана РГ-функция $\beta(g)$, определяемая поведением функции $\bar{g}(x, g)$ вблизи точки нормировки $x = 1$. Метод РГ заключается в предложении находить $\beta(g)$ на основе перенормированной теории возмущений. Если найти β по теории возмущений, подставить в уравнение (3.6) и решить его, то эта процедура будет соответствовать суммированию ряда теории возмущений или его бесконечной подпоследовательности [11].

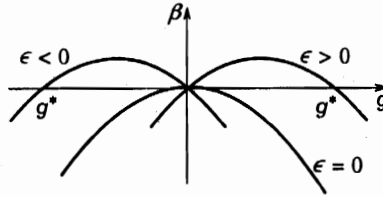


Рис. 1. Возможные формы $\beta(g)$

Из (2.12), (2.13) можно найти функции $f_i(x, g)$ в низшем приближении теории возмущений:

$$\begin{aligned}
 f_1(x, g) &= \bar{D}(t)/D = Z_1(\tau)/Z_1(t) \approx 1 + 2gAaB(1, \epsilon)(x^\epsilon - 1), \\
 f_2(x, g) &= q(t)/Q = Z_2(\tau)/Z_2(t) \approx 1 - gAB(1, \epsilon)(x^\epsilon - 1).
 \end{aligned}
 \tag{3.7}$$

Вычисляя $\beta(g)$ с помощью (3.7) и затем решая (3.6) с помощью метода характеристик [11], найдем

$$\begin{aligned}
 \tilde{g}(x, g) &= \frac{g x^\epsilon}{1 + (g/g^*)(x^\epsilon - 1)}, \\
 f_i(x, g) &= \{1 + (g/g^*)(x^\epsilon - 1)\}^{\zeta_i}, \\
 \zeta_1 &= a/\delta(1 + ad), \quad \zeta_2 = -1/2\delta(1 + ad), \\
 g^* &= \epsilon/2\delta A(1 + ad).
 \end{aligned}
 \tag{3.8}$$

Теперь остается выразить решение через исходные (неперенормированные) параметры задачи, исключив параметры τ, D, Q . Для этого рассмотрим общую структуру РГ-функции. В зависимости от знака ϵ могут возникнуть три различные ситуации, изображенные на рис. 1. Асимптотика будет определяться положением стационарных (неподвижных) точек g_i , удовлетворяющих условию $\beta(g_i) = 0$. Требованию устойчивости неподвижной точки при $t \rightarrow \infty$ соответствует условие $[\partial\beta(g)/\partial g]_{g=g_i} < 0$, а условием устойчивости неподвижной точки при $t \rightarrow 0$ будет требование $[\partial\beta(g)/\partial g]_{g=g_i} > 0$. Из рис. 1 видно, что в низшем приближении теории возмущений существуют две неподвижные точки: тривиальная $g = 0$, соответствующая отсутствию нелинейных взаимодействий (асимптотическая свобода) и нетривиальная $g = g^* \neq 0$, при этом положение нетривиальной неподвижной точки определяется знаком ϵ . Маргинальному случаю $\epsilon = 0$ соответствует слияние устойчивой и неустойчивой неподвижных точек.

Из условия $q(t) \geq 0, \bar{D}(t) \geq 0$ следует, что знак g определяется только знаком λ . Отсюда следует вывод о том, что в случае реакций поглощения ($\lambda > 0$) и $\epsilon > 0$ ($d < d_c$) при $t \rightarrow \infty$ реализуется некий устойчивый нелинейный режим, получающийся из начальных условий при $t \rightarrow 0$, соответствующих асимптотической свободе. При $\epsilon < 0$ ($d > d_c$) асимптотически свободный режим будет иметь место при $t \rightarrow \infty$, однако он может быть получен из заданных при $t \rightarrow 0$ «нефизических» граничных условий, которым отвечает $g < 0$.

При $\lambda < 0$ (случай реакций с порождением вещества) и $\epsilon > 0$ устойчивый при $t \rightarrow \infty$ режим будет отвечать «нефизическому» значению $\tilde{g} \rightarrow g^* > 0$ и, следовательно, область $t \rightarrow \infty$ должна быть исключена из рассмотрения. Однако при $\epsilon < 0$ в

данном случае должен реализовываться при $t \rightarrow \infty$ режим асимптотической свободы, получающийся из устойчивого при $t \rightarrow 0$ начального состояния, отвечающего условию $g < 0$.

Условие асимптотической свободы соответствует требованиям отсутствия перенормировки коэффициента диффузии и постоянства содержания вещества. Эти требования можно рассматривать как граничные условия, позволяющие в формулах (3.8) исключить τ и выразить Q, D через исходные параметры задачи. В соответствии с изложенным выше эта процедура осуществляется различным образом в зависимости от знаков λ и ϵ .

4. РАЗЛИЧНЫЕ РЕЖИМЫ ПОВЕДЕНИЯ СИСТЕМЫ

а. Реакция поглощения при размерности пространства ниже критической, $\lambda > 0$, $\epsilon > 0$ (реализуется для реакций бинарного типа в одномерном пространстве). Используя условия асимптотической свободы $q(0) = Q_0$, $\bar{D}(0) = D_0$, с помощью формул (3.4), (3.8) найдем

$$g = g_0[1 + (g_0/g^*)]^{-1}, \quad g_0 = \lambda Q_0^{2\delta} \tau^\epsilon / D_0^{\delta d}, \quad (4.1)$$

что после подстановки в (3.1) приводит к соотношениям

$$\begin{aligned} \bar{D}(t) &= D_0 \left[1 + \frac{\lambda Q_0^{2\delta}}{D_0^{\delta d}} \frac{1}{g^*} t^\epsilon \right]^{\zeta_1} = D_0 \left[1 + \frac{1}{g^*} \left(\frac{t}{T} \right)^\epsilon \right]^{\zeta_1}, \\ q(t) &= Q_0 \left[1 + \frac{\lambda Q_0^{2\delta}}{D_0^{\delta d}} \frac{1}{g^*} t^\epsilon \right]^{\zeta_2} = Q_0 \left[1 + \frac{1}{g^*} \left(\frac{t}{T} \right)^\epsilon \right]^{\zeta_2}, \quad T^{-\epsilon} = \frac{\lambda Q_0^{2\delta}}{D_0^{\delta d}}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Из (4.2) следуют выражения для амплитуды $C(t)$ и радиуса диффузионного пятна $l(t)$:

$$\begin{aligned} C(t) &= \frac{q(t)}{[4\pi \bar{D}(t)t]^{d/2}} = \frac{Q_0}{[4\pi D_0 t]^{d/2}} \left[1 + \frac{1}{g^*} \left(\frac{t}{T} \right)^\epsilon \right]^{-1/2\delta}, \\ l(t) &= \sqrt{4\bar{D}(t)t} = \sqrt{4D_0} \left[1 + \frac{1}{g^*} \left(\frac{t}{T} \right)^\epsilon \right]^{\zeta_1/2} t^{1/2}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

При больших t формулы (4.3) примут вид

$$\begin{aligned} C(t) &\rightarrow \frac{1}{(4\pi)^{d/2}} \left(\frac{\lambda t}{g^*} \right)^{-1/2\delta} = c(\lambda t)^{-1/(n-1)}, \\ l(t) &\rightarrow \sqrt{4D_0} (g^*)^{-\zeta_1/2} t^{1/2} (t/T)^{\epsilon \zeta_1/2}. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Согласно (4.4) асимптотика поведения амплитуды не зависит от параметра начального распределения Q_0 и соответствует автомодельным решениям, рассматривавшимся ранее [7]. Однако закон эволюции радиуса диффузионного пятна $l(t)$ оказывается зависящим от выбора начальных условий (параметра Q_0), т. е. реализуется режим неполной автомодельности (автомодельности второго рода) [14], когда $l(t) \propto t^{1/2+\alpha}$. Значение

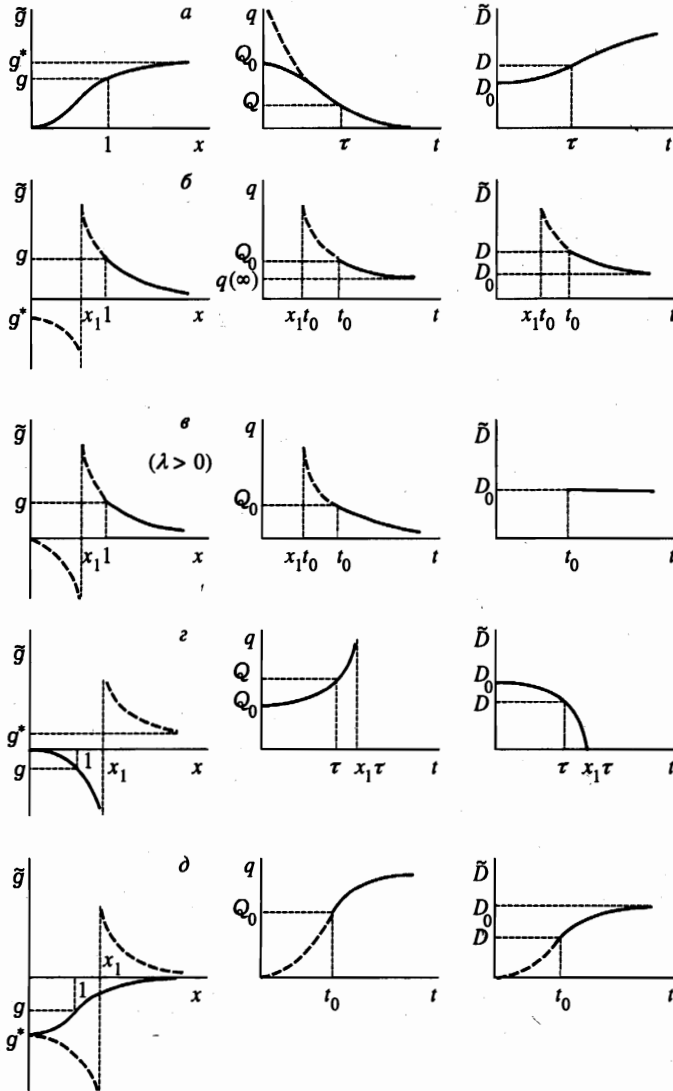


Рис. 2. Типичные кривые поведения $\tilde{g}(x, g), q(t)$ и $\tilde{D}(t)$ при различных ϵ, λ (см. текст, случаи а-д)

показателя неполной автомодельности α определяется только порядком реакции и размерностью пространства:

$$\alpha = \frac{1 - \delta d}{2\delta} \frac{a}{1 + ad}$$

Соответствующие кривые представлены на рис. 2а.

б. Реакция поглощения при размерности пространства выше критической, $\epsilon < 0, \lambda > 0$. Реализуемому при $t \rightarrow \infty$ режиму асимптотической свободы соответствует требование $\tilde{D}(\infty) = D_0$ и $q(\infty) = \text{const}$. Однако при $t \rightarrow 0$ оказывается $\tilde{g} \rightarrow g^* < 0$,

что соответствует нефизическим начальным условиям, поскольку согласно (3.3) должно выполняться соотношение $\bar{g} \geq 0$. Это обстоятельство связано с заданием начальных условий в виде обобщенной функции $\delta(r)$; появляющаяся при этом в уравнении (1.1) функция $\delta^n(r)$ является плохо определенной. Чтобы избежать этой трудности, следует в качестве начального условия использовать распределение с отличным от нуля радиусом (2.4'), положив $l_0 = \sqrt{4\bar{D}(t_0)t_0}$ и взяв t_0 в области, соответствующей положительным значениям \bar{g} . Таким образом, начальные условия теперь будут задаваться соотношениями

$$Q_0 = q(t_0), \quad l_0 = l(t_0). \quad (4.5)$$

Выбрав в качестве точки нормировки $\tau = t_0$ и учитывая $\bar{D}(t_0) = D$, найдем

$$\begin{aligned} q(t) &= Q_0 \left[1 + \frac{\lambda Q_0^{2\delta}}{D^{\delta d}} \frac{1}{(-g^*)} (t_0^\epsilon - t^\epsilon) \right]^{\zeta_1}, \\ \bar{D}(t) &= D \left[1 + \frac{\lambda Q_0^{2\delta}}{D^{\delta d}} \frac{1}{(-g^*)} (t_0^\epsilon - t^\epsilon) \right]^{\zeta_1}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

Из условия $\bar{D}(\infty) = D_0$ получим уравнение, выражающее t_0 через характеристики начальных условий $C_0 = C(t_0)$ и l_0 и параметры задачи λ, D_0 :

$$4D_0 t_0 = l_0^2 \left[1 + \frac{(4\pi)^{\delta d}}{(-g^*)} C_0^{2\delta} \lambda t_0 \right]^{\zeta_1}. \quad (4.7)$$

Для определяющих распределение, согласно (2.1), амплитуды и радиуса найдем

$$\begin{aligned} C(t) &= C_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^{-d/2} \left\{ 1 + \frac{(4\pi)^{\delta d}}{(-g^*)} C_0^{2\delta} \lambda t_0 \left[1 - \left(\frac{t}{t_0} \right)^\epsilon \right] \right\}^{-1/2\delta}, \\ l(t) &= l_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^{1/2} \left\{ 1 + \frac{(4\pi)^{\delta d}}{(-g^*)} C_0^{2\delta} \lambda t_0 \left[1 - \left(\frac{t}{t_0} \right)^\epsilon \right] \right\}^{\zeta_1/2}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

а для асимптотического содержания вещества получим

$$q(\infty) = Q_0 (4D_0 t_0 / l_0^2)^{-1/2\delta}. \quad (4.9)$$

Типичные кривые для $\bar{g}(x)$, $q(t)$ и $\bar{D}(t)$ представлены на рис. 2б.

в. Маргинальный случай критической размерности $\epsilon = 0$ (реализуется для реакций бинарного типа в двумерном пространстве). Примем во внимание, что при $\epsilon = 0$ согласно (2.13) оказывается $\zeta_1 = 0$ и перенормировки коэффициента диффузии не происходит. Тогда при учете формулы для g^* из (3.8) найдем

$$q(t) = Q_0 \{ 1 + 2\delta A g \ln(t/\tau) \}^{-1/2\delta}, \quad \bar{D}(t) = D_0. \quad (4.10)$$

Выбрав в качестве начального момента времени положение точки нормировки $\tau = l_0^2/4D_0$ и отсчитывая время от этого момента, получим

$$q(t) = Q_0 \left[1 + \frac{1}{\pi(d+2)} \frac{\lambda Q_0^{1/2d}}{D_0} \ln \frac{l(t)}{l_0} \right]^{-d/2}, \quad l(t) = \sqrt{l_0^2 + 4D_0 t}. \quad (4.11)$$

Из (4.11) следует, что в случае реакции поглощения ($\lambda > 0$) содержание вещества в пределе больших времен медленно убывает как степень логарифма, при этом асимптотика не зависит от начального содержания Q_0 . Однако в случае реакции рождения ($\lambda < 0$) содержание вещества растет и стремится к бесконечности за некоторый конечный промежуток времени, зависящий от характерных параметров задачи λ, D_0, Q_0, l_0 .

г. Реакция рождения при размерности ниже критической, $\epsilon > 0, \lambda < 0$ (реализуется для реакций бинарного типа в одномерном пространстве). В результате исключения перенормированных параметров с помощью условия асимптотической свободы при $t \rightarrow 0$ получаются формулы типа (4.2):

$$\begin{aligned} \tilde{D}(t) &= D_0 \left[1 - \frac{(-\lambda)Q_0^{2\delta}}{D_0^{\delta d}} \frac{1}{g^*} t^\epsilon \right]^{\zeta_1}, \\ q(t) &= Q_0 \left[1 - \frac{(-\lambda)Q_0^{2\delta}}{D_0^{\delta d}} \frac{1}{g^*} t^\epsilon \right]^{\zeta_2}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

С учетом соотношений $\zeta_1 > 0, \zeta_2 < 0$ получим, что с ростом времени $q(t)$ растет и при $t_1 = [(-\lambda)Q_0^{2\delta}/g^*D_0^{\delta d}]^{-1/\epsilon}$ возникает сингулярность (см. рис. 2з). Из (4.12) также следует, что локализованное первоначально распределение с конечным содержанием вещества сначала расплывается по закону линейной теории, а затем с дальнейшим ростом количества вещества распределение коллапсирует, и за конечное время t_1 происходит схлопывание, что соответствует реализации режимов с обострением [8]. Исследование предельного поведения вблизи момента схлопывания по-видимому требует выхода за рамки низшего приближения теории возмущений при вычислении функций $f_i(x, g)$, однако можно надеяться, что проведенное исследование все же позволяет оценить характер поведения и скорость эволюции режимов с обострением по крайней мере на ранней стадии процесса.

д. Реакция порождения при размерности выше критической, $\epsilon < 0, \lambda < 0$. Из общих формул (3.8) с учетом условий $\zeta_1 < 0, \zeta_2 < 0$ следует, что решения уравнений РГ для $q(t)$ и $\tilde{D}(t)$ при $t \rightarrow 0$ стремятся к нулю, что означает некорректность постановки начальной задачи Коши, связанной с использованием δ -образного распределения. Поэтому следует поступить, как и в случае б, выбрав в качестве начального момента времени $t = t_0$ и приняв его за точку нормировки. Анализ решений показывает, что в данном случае возможны два различных режима поведения, соответствующих ситуациям, представленным на рис. 2д в виде сплошной ($g/g^* < 1$) и штриховой ($g/g^* > 1$) кривых. Из рис. 2д видно, что при $g/g^* > 1$ область $x > x_1$ является «нефизической», так как для нее оказывается $\tilde{g} > 0$ при $\lambda < 0$.

В соответствии с условием нормировки в качестве граничных условий, позволяющих выразить константы интегрирования уравнений РГ $Q, D, \tau = t_0$ через начальные условия, задаваемые начальными значениями полного количества вещества Q_0 и ширины распределения l_0 или значениями начальной амплитуды $C_0 = Q_0/\pi^{d/2}l_0^d$ и l_0 , следует принять (4.5) и условие асимптотической свободы $\tilde{D}(\infty) = D_0$. Условие асимптотической свободы может быть использовано только при $g/g^* < 1$, тогда как при $g/g^* > 1$ область асимптотического поведения является нефизической и задача оказывается недоопределенной.

В результате исключения промежуточных параметров g, Q, D получим уравнения типа (4.6), (4.7), при этом условием существования решения для t_0 оказывается требование $g/g^* < 1$. Если же начальные условия выбраны таким образом, что выполняется

соотношение $g = g^*$, то решения примут вид

$$\begin{aligned} \bar{g}(x, g) = g^*, \quad q(t) = Q_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^{\epsilon \zeta_1}, \quad l(t) = l_0 \left(\frac{t}{t_0} \right)^{\epsilon \zeta_1 + 1/2}, \\ C(t) = \left[\frac{1 + 2\delta}{2\delta} \frac{\delta d - 1}{1 + ad} \right]^{-1/2\delta} (-\lambda t)^{-1/2\delta} \equiv c (-\lambda t)^{-1/2\delta}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Из (4.13) следует, что амплитуда в рассматриваемом вырожденном случае не зависит от выбора начальных условий, а количество вещества $q(t)$ и радиус диффузионного пятна $l(t)$ содержат временные зависимости, соответствующие режиму неполной автомодельности. Из последней формулы (4.13) по заданному значению начальной амплитуды C_0 можно найти t_0 и после его подстановки в выражения для $q(t)$ и $l(t)$ найти числовые коэффициенты при временных зависимостях.

5. ОБСУЖДЕНИЕ

В работе предложена новая версия применения метода РГ к проблеме описания химических реакций, контролируемых диффузионными процессами. В отличие от традиционно используемого метода РГ, когда перенормировке подвергаются характерные параметры системы — массы и заряды в теории поля или аналогичные им величины в других задачах, в данной работе осуществляется перенормировка параметров начальных условий — амплитуды и радиуса распределения. В соответствии с этим ренормализационная инвариантность явно проявляется как названное функциональной автомодельностью свойство независимости поведения системы от способа задания начальных (или граничных) условий [15]. Однако, если во многих случаях использование функциональной автомодельности приводит к тривиальным результатам в том смысле, что дифференциальные уравнения РГ оказываются совпадающими с исходными уравнениями задачи, в рассмотренном выше примере применение метода РГ дает нетривиальные результаты. Ранее свойство функциональной автомодельности использовалось в задаче нелинейной диффузии при исследовании асимптотических решений уравнения некоторого специального вида [16, 17].

В рамках примененного нами метода получены результаты, не всегда совпадающие с известными ранее. В частности, в случае реакции поглощения закон асимптотического затухания амплитуды со степенным показателем $-1/(n-1)$ (формула (4.4)) был получен при размерности пространства ниже критической, тогда как обычно принимается, что данный закон реализуется при размерности выше критической [3–5]. Это обстоятельство объясняется тем, что в использованных авторами указанных работ условиях применимости приближения среднего поля обремененные флуктуациям пространственные неоднородности поля малы и доминирующую роль играют процессы нелинейного затухания. Однако в данной работе рассматривается задача об эволюции первоначально локализованного распределения, а не о флуктуациях однородного в среднем распределения, когда расплывания нет и законы эволюции амплитуды и полного количества вещества не различаются. Существование автомодельных решений для амплитуды типа (4.4) было получено из других представлений в работе [7], где искались автомодельные асимптотики решений квазилинейного параболического уравнения, не зависящие от

начальных условий задачи («собственные функции»). При этих предположениях показатель затухания амплитуды следует из соображений размерности ($-1/(n-1)$), и было доказано, что затухающее на бесконечности быстрее чем по степенному закону распределение существует только при размерности ниже критической (случай a). И наоборот, при размерности выше критической, когда степень нелинейности является большой, на начальной стадии эволюции происходит быстрое уменьшение амплитуды, в результате чего нелинейный член оказывается несущественным и возникает режим асимптотической свободы, соответствующий диффузионному расплыванию согласно линейной теории при сохранении полного количества вещества. При этом оказывается, что режим асимптотической свободы может получиться не из любого начального распределения, а только при определенных ограничениях на амплитуду и ширину; это ограничение определяется областью существования вещественных решений уравнения (4.7) для параметра t_0 . В рамках метода РГ естественным образом возникают дополнительные логарифмические зависимости от времени при критической размерности [5]. Этот результат в рамках других технических подходов был получен ранее (см. обзор [7]).

Также естественным образом в рамках РГ-описания для случая реакций порождения вещества при размерности ниже критической получаются режимы с обострением, обнаруженные и исследованные ранее с помощью численных и полуаналитических методов при описании тепловых процессов [8]. Применение метода РГ в данной задаче позволяет получить оценки для скорости стягивания и времени схлопывания распределения и их зависимости от числовых параметров задачи.

В применении к задаче с реакциями поглощения традиционное ϵ -разложение в случае a фактически воспроизводит результаты размерного анализа при предположении, что асимптотика не зависит от начальных условий задачи (является универсальной). Однако наш результат показывает, что универсальность имеет место только в отношении амплитуды. Тем не менее полной универсальности нет, поскольку асимптотический закон роста ширины соответствует наличию аномальной размерности, и определяемый начальными условиями дополнительный размерный параметр не исчезает из рассмотрения в пределе больших времен. К задачам с порождением вещества метод РГ до сих пор вообще не применялся.

Анализ решений уравнений РГ дает возможность не только получить значения показателей степенного поведения физических величин в асимптотической области больших времен, но также проследить выход на асимптотический режим и найти числовые коэффициенты [6, 9].

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 96-01-00748).

Литература

1. Д. А. Франк-Каменецкий, *Диффузия и теплопередача в химической кинетике*, Наука, Москва (1987).
2. P. C. Martin, E. D. Siggia, and H. A. Rose, *Phys. Rev. A* **8**, 423 (1973).
3. L. Peliti, *J. Phys. A* **19**, L365 (1986).
4. M. Doi, *J. Phys. A* **9**, 1465 (1976).
5. T. Ohtsuki, *Phys. Rev. E* **43**, 6917 (1991).

6. В. Р. Lee, J. Phys. A **27**, 2633 (1994)
7. В. А. Галактионов, С. П. Курдюмов, А. А. Самарский, Мат. сб. **126**, 435 (1986).
8. А. А. Самарский, В. А. Галактионов, С. П. Курдюмов, А. П. Михайлов, *Режимы с обострением в задачах для нелинейных параболических уравнений*, Наука, Москва (1987).
9. Э. В. Теодорович, ПММ **62**, 443 (1998).
10. В. М. Ентов (частное сообщение).
11. Н. Н. Боголюбов, Д. В. Ширков, *Введение в теорию квантованных полей*, Наука, Москва (1984).
12. П. Рамон, *Теория поля: Современный вводный курс*, Мир, Москва (1984).
13. Дж. Коллинз, *Перенормировка*, Мир, Москва (1988).
14. Г. И. Баренблатт, *Подобие, автомодельность, промежуточная асимптотика*, Гидрометеиздат, Ленинград (1978).
15. Д. В. Ширков, ДАН СССР **263**, 64 (1982).
16. N. Goldenfeld, O. Martin, Y. Oono, and Fong Liu, Phys. Rev. Lett. **64**, 1361 (1990).
17. И. С. Гинзбург, В. М. Ентов, Э. В. Теодорович, ПММ **52**, 68 (1992); В. М. Ентов, Э. В. Теодорович, Теор. основы хим. технологии, № 3, 218 (1993).