УДК 536.24

Д.Н. Герасимов, В.А. Кондратьева, М.Н. Рудавина, О.И. Сидоренко

Московский энергетический институт (технический университет), Россия

К МАТЕМАТИЧЕСКОМУ ОПИСАНИЮ ТЕПЛО- И МАССОПЕРЕНОСА В НЕОДНОРОДНЫХ СРЕДАХ

АННОТАЦИЯ

Обсуждается модель тепло- и массопереноса в неоднородных средах, основанная на использовании дробно-дифференциальных операторов с переменным порядком.

1. ВВЕДЕНИЕ

Трудности в математическом описании тепло- или массопереноса, при котором уравнение распространения тепла или количества частиц подчиняется параболическому уравнению, известны, по-видимому, начиная с момента появления этих уравнений. Бесконечная скорость распространения возмущений – лишь одна (хотя и наиболее известная) проблема, демонстрирующая не полную адекватность обычного уравнения теплопроводности/диффузии реальным физическим процессам. Более интересными являются вопросы, связанные с обоснованием корректности законов Фурье/Фика, приданием физического смысла переносным коэффициентам (диффузии и температуропроводности) – что подразумевает в том числе возможность их вычисления из первичных принципов, а также определение более общего вида уравнения переноса: количество и порядок дифференциальных операторов, наличие либо отсутствие интегральных операторов, призванных учитывать (либо нет) наличие некоей «памяти» в системе и т.п. [1–3].

Разрешение перечисленных затруднений в большинстве случаев реализуется эклектическим путем: для описания распространения тепла с конечной скоростью используется телеграфное уравнение; закон Фурье считается справедливым с учетом переменности коэффициента теплопроводности, который вычисляется из экспериментальных данных; требуемые в конкретных случаях «нелокальности» вводятся по мере необходимости, в том числе в виде интегральных членов, как например, в реологических моделях. Обобщение имеющихся в литературе способов описания переноса может сложиться в фигуру, подобную «тришкиному кафтану», где одни элементы конструкции логически противоречат другим. Например, придавая смысл коэффициенту диффузии как отношению среднего квадрата смещения частицы к удвоенному времени, за которое это смещение произошло, мы с неизбежностью получим (используя эйнштейновский вывод уравнения диффузии [4]) уравнение с диффузионным членом в виде $D\partial^2 n/\partial x^2$, даже для среды с переменными свойствами (в виде $D(x)\partial^2 n/\partial x^2$). Такой подход противоречит более распространенному способу вывода уравнения диффузии – через закон сохранения массы с учетом закона Фика для плотности потока; таким образом, диффузионный член получится в виде $\dfrac{\partial}{\partial x}D(x)\dfrac{\partial n}{\partial x}$. Еще один пример – уже упомянутая бесконечная скорость распространения возмущений, с которой можно «бороться» путем введения в уравнение второй производной по времени, например, удержав два члена в разложении по времени при эйнштейновском подходе. Однако данный способ нелогичен: при том же самом способе вывода уравнения диффузии [4] требуется предположение о малости смещения частиц за рассматриваемые промежутки времени, тем самым при разложении в ряд по пространственным координатам пренебрегается значительными смещениями частиц. Таким образом, исходное уравнение диффузии (а вместе с тем и теплопроводности, если исходить из предположения о схожем характере диффузии и распространении тепла) изначально не приспособлено описывать распространение с высокой скоростью, поэтому «хвост» решения задачи о диффузии из точечного источника, с помощью которого обычно и демонстрируется бесконечная скорость распространения возмущений, представляет собой просто выход за пределы применимости используемого уравнения.

С другой стороны, определенный интерес при конструировании математических моделей представляет и более последовательный подход, в построении которого приходится апеллировать в большей степени к логике, нежели к частным экспериментальным данным. Принцип «природа знает лучше» пригоден в экологии, однако формирование математического описания должно подчиняться несколько иным исходным принципам.

2. МАТЕМАТИЧЕСКИЙ АППАРАТ

В предлагаемой работе для описания переноса массы и тепла используется известный аппарат дробного интегродифференцирования [5, 6], уже сравнительно долго (примерно в течение последних 30 лет) используемый для решения самых разнообразных задач [7].

Оперируя обобщенными производными – не только первого, второго и т.д. порядков, но и дробного (вообще говоря, даже комплексного, однако подобные конструкции пока не нашли широкого практического применения), – можно добиться своего рода интерполяции в определении такой математической конструкции, как производная. Стоит отметить, что на сегодняшний день известно большое количество различных форм дробных производных: Римана–Лиувилля, Грюнвальда–Летникова, Маршо, Вейля, Рисса, Капуто и др., причем совпадение этих конструкций может быть доказано только для функций определенного вида (коротко говоря, для достаточно гладких функций, достаточно быстро убывающих на бесконечности).

Несмотря на то, что собственно математическая теория дробно-дифференциальных операторов в общем еще далека от своего завершения, использование таких конструкций оказывается плодотворным в самых различных областях науки [7], что поддерживает надежду относительно того, что теория тепломассопереноса не окажется исключением.

3. ОБОБЩЕННОЕ УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ

Мы будем исходить из представления о диффузии [4]. Пусть перемещение частицы из точки x на расстояние Δ (в положительном направлении оси x) за время τ описывается функцией плотности вероятности $\varphi(\Delta,\tau;x)$. Тогда количество частиц в точке x в момент времени $t+\tau$

$$n(x,t+\tau)=\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\varphi(\Delta,\tau;x)\,n(x-\Delta,t)\,d\Delta . \qquad (1)$$

Разложим теперь функцию n в ряд по дробным производным (аналогично ряду Тейлора) [5]:

$$n(x,t+\tau)=\sum_k \frac{1}{\Gamma(\alpha+k+1)}\frac{\partial^{\alpha+k}n}{\partial t^{\alpha+k}}\tau^{\alpha+k} ; \qquad (2)$$

$$n(x-\Delta,t)=\sum_k \frac{1}{\Gamma(\beta+k+1)}\frac{\partial^{\beta+k}n}{\partial x^{\beta+k}}(-\Delta)^{\beta+k} , \qquad (3)$$

где $\Gamma(z)$ – гамма-функция. Далее будем использовать (2) и (3), где базовые порядки дифференцирования α и β, вообще говоря, различны, с учетом только первых слагаемых, для чего необходимо считать, что рассматриваемые нами времена τ и смещения Δ малы. Подставляя эти выражения в (1), получаем обобщенное – фрактальное (т.е. записанное через дробные – фрактальные производные, далее ФУД):

$$\frac{\partial^{\alpha}n}{\partial t^{\alpha}}=D\frac{\partial^{\beta}n}{\partial x^{\beta}} , \qquad (4)$$

где коэффициент диффузии

$$D(x)=\frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(\beta+1)}\frac{(-1)^{\beta}}{\tau^{\alpha}}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}\varphi(\Delta,\tau;x)\Delta^{\beta}d\Delta . \qquad (5)$$

Порядки дифференцирования α и β должны подбираться таким образом, чтобы коэффициент диффузии при $\tau\to 0$ оставался конечной величиной. Отсюда следует в общем случае закон аномальной диффузии в виде:

$$\left\langle \Delta^{\beta}\right\rangle \sim \tau^{\alpha} . \qquad (6)$$

Однако в случае неоднородной среды, когда вероятность смещения зависит от пространственной координаты, нет уверенности, что подбираемые из условия конечности коэффициента диффузии α и β окажутся постоянными величинами. Вполне возможно (это зависит от свойств функции φ), что для того, чтобы корректно описать диффузионный перенос в неоднородной среде, придется использовать зависящие от координат степени в (5), что автоматически влечет за собой использование достаточно оригинальных дифференциальных операторов в (4), содержащих переменные порядки дифференцирования. В следующих разделах уравнения с такими операторами будут рассмотрены более подробно.

4. ФРАКТАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ С ПЕРЕМЕННЫМ ПОРЯДКОМ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ ПО ВРЕМЕНИ

Такое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial^{\alpha(x)}n}{\partial t^{\alpha(x)}}=D(x)\frac{\partial^{\beta}n}{\partial x^{\beta}} . \qquad (7)$$

В принципе, такое уравнение не имеет особых отличий в плане способа его решения по сравнению с ФУД с постоянным порядком дифференцирования. В данном случае, разлагая в ряд Фурье

$$n=\sum \tilde{n}(x)\exp(i\omega t) \qquad (8)$$

и используя производную Вейля, так что

$$\frac{\partial^{\alpha(x)}n}{\partial t^{\alpha(x)}}=\sum \tilde{n}(i\omega)^{\alpha(x)}\exp(i\omega t) , \qquad (9)$$

получаем уравнение для пространственного множителя

$$\tilde{n}(i\omega)^{\alpha(x)}=D(x)\frac{d^{\beta}\tilde{n}}{dx^{\beta}} , \qquad (10)$$

которое в общем случае может быть решено с помощью операционного преобразования либо последовательными приближениями [5]. В последнем случае можно записать последовательность для получения решения в виде

$$\tilde{n}(x)=C^{\beta}(x)+I^{\beta}\left(\tilde{n}(x)\frac{(i\omega)^{\alpha(x)}}{D(x)}\right) , \qquad (11)$$

где I^{β} – дробный интеграл порядка β; $C^{\beta}(x)$ – "константа" для производной порядка β, такая что $\frac{d^{\beta}C^{\beta}}{dx^{\beta}}=0$; как известно, в общем случае такая "константа" зависит от x [5, 6], например, для производной Римана–Лиувилля $C^{\beta}\sim x^{\beta-1}$.

5. ФРАКТАЛЬНОЕ УРАВНЕНИЕ ДИФФУЗИИ С ПЕРЕМЕНЫМ ПОРЯДКОМ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ ПО ПРОСТРАНСТВУ

Соответствующее уравнение имеет вид

$$\frac{\partial^{\alpha} n}{\partial t^{\alpha}} = D(x)\frac{\partial^{\beta(x)} n}{\partial x^{\beta(x)}}. \qquad (12)$$

Этот случай намного интереснее рассмотренного в предыдущем разделе. Прежде всего необходимо определить производную по координате с порядком дифференцирования, зависящим от этой же координаты. Мы сделаем это, используя производную Грюнвальда–Летникова, которая кажется наиболее подходящей для такой операции:

$$\frac{\partial^{\beta(x)} n(x)}{\partial x^{\beta(x)}} = \lim_{h\to 0}\frac{1}{h^{\beta(x)}}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\binom{\beta(x)}{k}n(x-kh), \qquad (13)$$

где биномиальный коэффициент

$$\binom{\beta(x)}{k} = \frac{\Gamma(\beta(x)+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\beta(x)-k+1)}. \qquad (14)$$

Заметим, что производная (13) от экспоненциальной функции дает

$$\frac{d^{\beta(x)} e^{ax}}{dx^{\beta(x)}} = \lim_{h\to 0}\frac{1}{h^{\beta(x)}}\sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k\binom{\beta(x)}{k}\exp(ax-akh) =$$

$$= e^{ax}\lim_{h\to 0}\frac{\left(1-e^{-ah}\right)^{\beta(x)}}{h^{\beta(x)}} = a^{\beta(x)}e^{ax}. \qquad (15)$$

Используя разложение в ряд Фурье по времени, аналогичное (10), получаем обыкновенное дифференциальное уравнение в виде

$$(i\omega)^{\alpha}\,\tilde{n} = D(x)\frac{d^{\beta(x)}\tilde{n}}{dx^{\beta(x)}}, \qquad (16)$$

решение которого можно найти, используя (22), из системы уравнений для коэффициентов N_j, $\tilde{n} = \sum_j N_j \exp(ik_j x)$:

$$\sum_j N_j \exp(ik_j x) = \sum_l\sum_m d_l N_m \exp(ik_l x)\exp(ik_m x), \qquad (17)$$

где d_l – коэффициенты в разложении $\frac{D(x)(ik_m)^{\beta(x)}}{(i\omega)^{\alpha}} = \sum_l d_l \exp(ik_l x)$. Решение (17) можно получить, приравнивая коэффициенты при соответствующих экспонентах с показателями k_j и $k_l + k_m = k_j$.

В простых частных случаях решение (17) можно записать непосредственно. Например, если $D(x) = Ae^{-ax}$, $\beta(x) = ax$, то решение (17) может быть представлено в виде $n \sim \exp(\lambda t + ex)$, где $\lambda = \sqrt[\alpha]{A}$.

6. О ФРАКТАЛЬНЫХ УРАВНЕНИЯХ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

Приложение полученных уравнений к переносу тепла имеет свою специфику. В данном случае не приходится пользоваться такими понятиями, как вероятность смещения, так для начала необходимо определить, вероятность смещения чего собственно рассматривается.

Вставая на сугубо формальную позицию, можно механически распространить полученные уравнения диффузии на процессы переноса тепла, декларируя аналогию процессов тепло- и массопереноса. Однако указанная аналогия возникает именно из сходного математического описания, что как раз и требуется обосновать.

Если же связать распространение тепла с распространением фононов и электронов в конденсированных телах (или движением частиц в газе), то сказанное выше о диффузии может быть применено к описанию переноса тепла, но со значительными оговорками. Функция φ из уравнения (1) будет представлять собой плотность вероятности переноса энергии неупорядоченного движения макроскопическими (это особенно важно) порциями частиц, функция n из того же уравнение – значение самой неупорядоченной энергии.

Мерой энергии неупорядоченного движения является температура, но было бы поспешным закончить на этом анализ аналогии тепло- и массопереноса. Температура, понимаемая в механистическом смысле, является мерой средней хаотической кинетической энергии частиц, таким образом, само понятие температуры требует наличия достаточно большого конгломерата частиц, движущихся по гладким, то есть дифференцируемым траекториям. Отсутствие гладкости у траекторий, которое может проявляться, например, в процессах аномальной диффузии в неупорядоченных средах, приводит к отсутствию скорости у частиц (можно вспомнить знаменитое «отсутствие скорости у ветра» Л.Ф. Ричардсона), следовательно, к отсутствию у них кинетической энергии в прямом смысле этого понятия (как энергии, связанной со скоростью), следовательно, к отсутствию температуры у тела (!). Таким образом, непосредственное приложение уравнений диффузии к переносу тепла возможно только в случае дополнительного обоснования используемых терминов. В случае, когда можно выделить пространственно-временной интервал, на котором справедливо описание движения частиц с помощью обыкновенных дифференциальных уравнений с целочисленным порядком производной, можно ввести понятие температуры и следовать полученным выше уравнениям диффузии, используя их для описания теплопроводности. Если же такого интервала выделить не удается, то само понятие скорости, а вместе с тем кинетической энергии и температуры, теряет смысл. В таком случае требуется формулировка нового инварианта движения, возникающего в системе дробно-дифференциальных уравнений и имеющего смысл энергии, связанной как с текущим положением частицы (потенциальная энергия), так и с ее движением (кинетическая энергия). При этом вполне возможно окажется, что данный инвариант будет включать в себя не локальные характеристики, а всю предысторию движения: практически всегда процесс, подчиняющийся уравнениям с дробным порядком дифференцирования, оказывается обладающим «памятью» (это связано с самой формой многих операторов дробного интегродифференцирования); может даже оказаться, что потенциальную энергию невозможно будет отделить от кинетической. Впрочем, рассмотрение данных вопросов, а также извлечение из полученного инварианта движения такой характеристики, как температура, выходят за рамки настоящей работы.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе предложено описание переноса в неоднородной среде с помощью фрактального (дробно-дифференциального) уравнения диффузии с переменными показателями дифференцирования. Переменность порядков производных диктуется необходимостью конечности коэффициента диффузии в среде с переменными свойствами.

Используемые математические конструкции в таком описании несколько необычны и сами по себе требуют дополнительного изучения. В частности, использованная выше производная Грюнвальда–Летникова может оказаться отнюдь не самой подходящей отправной точкой. Кроме того, особо следует подчеркнуть необходимость формулировки обратных (интегральных) операторов к применяемым в работе дробно-дифференциальным операторам.

Полученные уравнения диффузии не допускают прямой их перенос на случай теплопроводности. Ряд обсуждаемых выше особенностей не позволяет в общем случае сформулировать уравнение теплопроводности диффузионного типа ввиду неопределенности исходных понятий.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. **Pascal H.** A nonlinear model of heat conduction // J. Phys. A.: Math. Gen. 1992. V. 25. P. 939 –948.
2. **Prozen T., Campbell D.K**. Normal and anomalous heat transport in one-dimensional classical lattices // Chaos. 2005. V. 15. P. 015117-1 – 015117-17.
3. **Li B., Wang J., Wang L., Zhang G.** Anomalous heat conduction and anomalous diffusion in nonlinear lattices, single walled nanotubes, and billiard gas channels // Ibid. P. 015121-1 – 015121-13.
4. **Эйнштейн А.** О движении взвешенных в покоящейся жидкости частиц, требуемом молекулярно-кинетической теорией теплоты// А. Эйнштейн. Собрание научных трудов. Т. III. М.: Наука, 1966. 632 с.
5. **Самко С.Г., Килбас А.А., Маричев О.И.** Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. Минск: Наука и техника, 1987. 688 с.
6. **West B.J., Bologna M., Grigolini P.** Physics of Fractal Operators. New York: Springer-Verlag, 2003. 354 p.
7. **Applications** of fractional calculus in physics / Ed. R. Hilfer. World Scientific: 2000. 464 p.