ЭФФЕКТ БЛОКАДЫ И КОНЦЕНТРАЦИОННОЕ ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ «НАПРАВЛЕНИЯ» СЛЕДА ВКЛЮЧЕНИЯ В РЕШЕТОЧНОМ ГАЗЕ

А. В. Клюшниченко, С. П. Лукьянец*

Институт физики Национальной академии наук Украины 03028, Киев, Украина

Поступила в редакцию 15 октября 2013 г.

Показано концентрационное переключение направления профиля следа при обтекании включения в потоке частиц броуновского газа при наличии короткодействующих корреляций между ними. Переключение следа вызвано эффектом блокады частиц. Подобный эффект переключения не возникает при движении примеси в тянущем поле, когда след проявляется в виде локальной плотной области перед включением и протяженного хвоста разрежения позади, характеризующего долговременную память среды о прохождении включения. Результаты получены в рамках модели двухкомпонентного решеточного газа, а характерные асимптотики профиля следа обсуждаются в длинноволновом приближении.

DOI: 10.7868/S0044451014060159

1. ВВЕДЕНИЕ

Движение пробной частицы или включения в среде (жидкость, газ, твердое тело, пр.) сопровождается ее возмущением, например, возмущением ее плотности, которое может проявляться в виде следа, оставляемого частицей. Структура и форма возмущения, создаваемого частицей, могут иметь различную природу и зависят от механизма энергопотерь. Возмущение может проявляться как черенковское излучение, образование турбулентного следа, вихрей, локальных фазовых превращений и имеет место как в случае классической среды, например, в гидродинамике [1–4], оптике [5], твердом теле [6, 7], так и в квантовом случае, например, для бозе-конденсата [8–11] или квантовой жидкости [12].

Когда скорость пробной частицы мала, например, меньше скорости звука, и можно пренебречь гидродинамическими эффектами, след описывается в диффузионном приближении [13]. В данной работе мы будем интересоваться диффузионным следом включения в броуновском газе частиц при наличии короткодействующих корреляций между ними.

Особенностью диффузионного следа является его большая пространственная и временная протяженность, которая характеризует память среды о прохождении включения [7, 12, 14–20]. Обычно пространственно-временное затухание возмущения среды позади включения или пробной частицы имеет степенной характер, что типично для многих систем [4, 12, 20].

Возмущение плотности газа (след) определяет силу трения или диссипативную силу, действующую на включение. В случае двух и более включений наличие долговременного следа, оставляемого ими при движении, приводит к долговременным корреляциям [21–23] и дальнодействующему диссипативному взаимодействию между ними, иногда именуемому в литературе неравновесными силами разрежения [24–28]. В свою очередь, это взаимодействие играет ключевую роль при формировании диссипативных структур.

Наличие корреляций или взаимодействия между частицами газа приводит к целому ряду необычных кинетических эффектов, например, дрейфующим пространственным структурам [29, 30], отрицательной диффузии [31–33], долговременным отрицательным корреляциям [21–23]. Даже при наличии короткодействующих корреляций между частицами, как, например, в решеточном газе, когда узел может быть оккупирован только одной частицей, стохастическая динамика пробной частицы демонстрирует пространственно-временной эффект памя-

^{*}E-mail: lukyan@iop.kiev.ua

ти [34], а в тянущем поле подчиняется супердиффузионному режиму [19, 20].

Здесь мы покажем, что в газе с короткодействующими межчастичными корреляциями (например, условие исключенного объема) след может принимать неожиданную структуру, характеризуемую переключением своей направленности в зависимости от равновесной концентрации газа, причем такой эффект переключения имеет место в случае обтекания неподвижного включения потоком газа и не возникает при движении самого включения [20].

Обычно, след или профиль возмущения концентрации газа при движении включения имеет характерную структуру — с плотной локализованной областью газа перед включением и протяженным разреженным хвостом позади него, который затухает степенным образом. В решеточном газе след от пробной частицы затухает как $|\mathbf{r}|^{-2} \ln |\mathbf{r}| (|\mathbf{r}|^{-3/2})$ в трехмерном (двумерном) случае [14-18]. Здесь мы покажем, что след, создаваемый включением, в потоке того же решеточного газа может быть расположен не, как обычно, позади включения, а впереди него. Точнее, структура возмущения может иметь вид, который характеризуется плотной протяженной областью перед включением и локализованной областью разрежения позади него, причем появление такой инверсионной структуры «хвост вперед» возникает, когда равновесная концентрация газа становится выше критической (1/2), т. е. имеет место концентрационное «переключение» следа. Такая необычная форма профиля обусловлена эффектом блокады частиц решеточного газа перед включением, что возможно при наличии потока и высокой концентрации.

Для того чтобы продемонстрировать переключение следа и его асимптотическое поведение, мы обратимся к простейшей модели решеточного газа с исключенным объемом, когда узел может быть оккупирован только одной частицей, и для простоты рассмотрим макроскопическое включение, в общем случае проницаемое, размеры которого много больше постоянной решетки. Мы также воспользуемся приближением среднего поля и длинноволновым приближением, пренебрегая короткодействующими корреляциями и флуктуациями в решеточном газе.

2. МОДЕЛЬ

Мы рассматриваем неподвижное макроскопическое включение, находящееся в потоке решеточного газа, который вызван внешним постоянным полем **F**. Чтобы описать включение, в общем случае проницаемое, и последовательно ввести «взаимодействие» между ним и частицами газа, мы обратимся к двухкомпонентному решеточному газу.

Для многокомпонентного решеточного газа, как известно [33, 34], возникают дополнительные межчастичные корреляции, обусловленные различимостью частиц разных сортов, в частности, это пространственно-временной эффект памяти, который проявляется в корреляциях между прыжками частицы, вызванных присутствием частиц другого сорта, и приводит к тенденции возврата частицы на прежнюю позицию [34]. На макроскопическом уровне (в длинноволновом приближении) дополнительные корреляции проявляются в кинетике как нелинейный перемешивающий поток между различными компонентами газа [29, 30, 33, 35–38].

В предельном случае, когда подвижность частиц одной из компонент стремится к нулю и ее можно считать статичной, кинетика быстрой компоненты описывает диффузию частиц в неоднородной среде. Неоднородность определяется распределением статичной компоненты, а характер взаимодействия частиц быстрой компоненты с неоднородностью описывается редуцированным перемешивающим потоком, см. работу [33]. В данных приближениях включение задается как локализованный кластер статичной компоненты.

Рассмотрим простейшую модель двухкомпонентного решеточного газа с условием исключенного объема. Кинетика определяется случайными прыжками частиц на соседние свободные узлы прямоугольной решетки. Изменение заселенности *i*-го узла частицами сорта α за время Δt , $\tau_0 \ll \Delta t \ll \tau_l$ (τ_0 — длительность прыжка на соседний узел, τ_l — время жизни частицы на узле) описывается стандартным уравнением непрерывности (см., например, [34, 39, 40])

$$n_i^{\alpha}(t+\Delta t) - n_i^{\alpha}(t) = \sum_j \left(J_{ji}^{\alpha} - J_{ij}^{\alpha} \right) + \delta J_i^{\alpha}.$$
(1)

Здесь $n_i^{\alpha} = 0, 1$ — локальные числа заполнения *i*-го узла частицами сорта α ,

$$J_{ij}^{\alpha} = \nu_{ij}^{\alpha} n_i^{\alpha} \left(1 - \sum_{\beta} n_j^{\beta} \right) \Delta t$$

— среднее число прыжков частиц α с *i*-го на соседний *j*-й узел за время Δt , $\beta(\alpha) = 1, 2$ обозначает сорт частиц, а $\nu_{ij}^{\alpha} = \nu^{\alpha}$ есть средняя частота этих прыжков. Слагаемое

$$\delta J_i^{\alpha} = \sum_j (\delta J_{ji}^{\alpha} - \delta J_{ij}^{\alpha})$$

10*

— ланжевеновский источник, который определяется флуктуациями δJ_{ji}^{α} числа прыжков между узлами jи i за время Δt [39, 40]. Эти флуктуации вызваны быстрыми, по сравнению с временами Δt , процессами, которыми для простоты мы будем пренебрегать.

Когда частота прыжков частиц одного сорта $(\alpha = n)$ мала, $\nu_n \to 0$, соответствующую компоненту газа можно считать статичной, а ее распределение будет задавать неоднородность среды для подвижных частиц другой компоненты $(\alpha = m)$.

Для регулярной решетки в отсутствие внешних полей $\nu_{ji}^m = \nu^m = \nu = \text{const.}$ Тянущее поле приводит к асимметрии прыжков частиц. Полагая механизм прыжков активационным, а тянущее поле \mathbf{F} малым, частоту можно представить в виде $\nu_{ji}^m \approx \nu [1 + (\mathbf{F}, \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)/(2kT)]$, либо $\nu^{\pm} \approx \nu \pm \delta \nu$, где ν^+ обозначает частоту прыжков вдоль поля, ν^- против поля, $\delta \nu = \nu a |\mathbf{F}|/(2kT)$ (a — постоянная решетки) и предполагается, что $a |\mathbf{F}|/(2kT) < 1$.

Используя приближение локального равновесия [39, 40, 41], которое в нашем случае совпадает с приближением среднего поля [42], можно перейти от уравнения (1) к уравнению для средних чисел заполнения узлов. Вводя временную производную [43], в длинноволновом приближении (см. работы [29, 30, 33, 35, 36]) макроскопическая кинетика для подвижной компоненты *m* задается уравнением

$$\dot{m} = \nabla^2 m - \nabla (n\nabla m - m\nabla n) - (\mathbf{f}, \nabla)[m(1 - n - m)], \quad (2)$$

где $m(\mathbf{r}, \tau), n(\mathbf{r})$ — средние числа заполнения в точке **r**, которые могут принимать значения в интервале [0,1], а $\mathbf{f} = a\mathbf{F}/(2kT)$. Здесь введены безразмерные координата $\mathbf{r}/a \to \mathbf{r}$ и время $\tau = \nu t$.

Дополнительные межчастичные корреляции, вызванные различимостью частиц, описываются перемешивающим потоком $n\nabla m - m\nabla n$ в правой части уравнения (2), который приводит к ряду аномальных эффектов [29, 30, 33, 35–38]. Последнее слагаемое определяет нелинейный дрейфовый поток, индуцированный внешней силой **F**, см. [29, 30, 35, 36].

Заметим, что корреляции, вызванные различимостью частиц, приводят к дополнительным косвенным корреляциям между частицами одного сорта, где переносчиком взаимодействия выступают частицы другой компоненты [21–23]. Такие косвенные корреляции обусловливают диссипативные взаимодействия или силы между частицами одного сорта и, в частности, могут приводить к эффекту спаривания [25], а учет флуктуаций приводит к дополнительным



Рис.1. Установившееся распределение концентрации (средних чисел заполнения) частиц газа m(x, y) вблизи включения при различных значениях равновесной концентрации m_0 : $a - m_0 = 0.2$, $\delta - m_0 = 0.5$, $e - m_0 = 0.8$. Внешняя сила $|\mathbf{f}| = 0.5$ направлена вдоль x, непроницаемое включение ($n_0 = 1$) радиуса R = 7 постоянных решетки расположено в центре. На всех рисунках серый цвет фона соответствует равновесной концентрации газа m_0

флуктуационным или «казимироподобным» силам, см., например, [44–46].

3. «ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ» ФОРМЫ ПРОФИЛЯ

В дальнейшем мы рассмотрим двумерный решеточный газ и однородное круговое включение радиуса $R \gg a$ с постоянной плотностью $n(\mathbf{r}) =$ $= n_0 = \text{const.}$

Установившееся распределение концентрации решеточного газа при обтекании включения для различных равновесных концентраций m_0 приведены на рис. 1. Данные результаты получены численно для средних чисел заполнения узлов квадратной решетки в приближении среднего поля для уравнения (1).

При низких концентрациях $(m_0 < 1/2)$ профиль имеет типичную структуру [20, 24, 26, 27] и характеризуется наличием протяженной разреженной области за включением (след) и локализованной плотной области перед ним, рис. 1 а. В случае высоких концентраций $(m_0 > 1/2)$ профиль приобретает нестандартный вид с плотной протяженной областью газа перед включением и локализованной, обладающей формой каверны, областью разрежения позади него, рис. 1 в.

Такое поведение связано с эффектом блокады частиц решеточного газа. Условие, что на узле может находиться только одна частица газа, эквивалентно бесконечному отталкиванию между частицами на одном узле. Формирование плотной области перед включением связано с торможением частиц. Наличие отталкивающего взаимодействия приводит к режиму блокады, газ становится несжимаемым впереди включения, что фактически означает эффективный рост размеров включения. При достаточно высокой концентрации газа частицы не будут успевать выходить из зоны блокады за счет латеральной диффузии и, как результат, эффективный размер включения будет расти. Другими словами, будет расти плотная область впереди включения.

При равновесной концентрации газа $m_0 = 1/2$ система демонстрирует симметричные относительно включения протяженные области высокой и низкой плотности частиц решеточного газа, рис. 16.

Как нетрудно заметить на рис. 1, области повышенной и низкой плотности вблизи включения при низких ($m_0 < 1/2$) и при высоких ($m_0 > 1/2$) равновесных концентрациях являются зеркально симметричными.

Наличие такой симметрии (инверсии) легко показать, используя уравнение (2), которое можно переписать в виде

$$\dot{m} = \nabla (h\nabla m - m\nabla h - \mathbf{f}mh),\tag{3}$$

где h = 1 - m - n описывает концентрацию вакансий, т.е. пустых узлов. Уравнение (3) инвариантно относительно замены $m \leftrightarrow h$, $\mathbf{f} \leftrightarrow -\mathbf{f}$. Это означает, что (3) может быть записано как

$$\dot{h} = \nabla (m\nabla h - h\nabla m + \mathbf{f}mh). \tag{4}$$

Уравнение (3) описывает кинетику частиц решеточного газа с равновесной концентрацией m_0 в тянущем поле **f**, в то время как уравнение (4) соответствует кинетике вакансий с равновесной концентрацией $h_0 = 1 - m_0$ в противоположно направленном тянущем поле $-\mathbf{f}$. Если след от включения в потоке частиц газа характеризуется областью разрежения позади него, то след в потоке вакансий характеризуется областью разрежения вакансий, т. е. плотной областью частиц газа позади включения (относительно направления потока вакансий). Такое обращение следа имеет место для произвольной равновесной концентрации m_0 . Возмущению плотности газа $\delta m(x, y; m_0)$, возникающему при значении концентрации m_0 , всегда соответствует инверсный профиль возмущения $\delta m(x, y; 1 - m_0)$ при значении $1 - m_0$:

$$\delta m(x, y; 1 - m_0) = -\delta m(-x, y; m_0).$$
(5)

Здесь предполагается, что поле **f** направлено вдоль оси x. В частном случае, при $m_0 = 1/2$ профиль возмущения плотности имеет симметричный вид, рис. 1*б*.

Другими словами, при повышении концентрации происходит инверсия следа от «разреженного длинного хвоста» позади включения при низкой концентрации частиц к «плотному длинному хвосту» впереди включения при высокой концентрации частиц (малой концентрации вакансий).

4. «ПЕРЕКЛЮЧЕНИЕ» АСИМПТОТИЧЕСКИХ РЕЖИМОВ

Симметрия уравнения (2) позволила качественно объяснить инверсию следа, полученную численно для решеточного газа в приближении среднего поля, рис. 1. Здесь мы рассмотрим асимптотическое поведение возмущения плотности газа вдали от включения, используя линейное приближение для дрейфового потока в уравнении (2). Данное приближение позволяет, хотя и грубо, объяснить концентрационное переключение следа как непрерывный переход между различными асимптотическими режимами. «Схлопывание» следа (области разрежения) позади частицы при увеличении концентрации m_0 соответствует переходу от степенного асимптотического поведения, определяющего протяженный след, рис. 1а, к экспоненциальному, характеризующему локализацию области разрежения, рис. 1 в. В то же время асимптотика поведения области повышенной плотности впереди включения претерпевает переход от экспоненциального к степенному режиму.

Чтобы это показать, рассмотрим стационарную задачу

$$\nabla[(1-n)\nabla m + m\nabla n] - (\mathbf{f}, \nabla)[m(1-n-m)] = 0, \quad (6)$$

где распределение $n(\mathbf{r})$ задает включение, а $m(\mathbf{r})$ описывает распределение плотности газа.

Далее нам будет удобно перейти к новой функции

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{m(\mathbf{r})}{1 - n(\mathbf{r})},\tag{7}$$

где предполагается, что $n(\mathbf{r}) \neq 1$, уравнение для которой имеет вид

$$\nabla \left\{ \varepsilon \left[\nabla \psi - \psi \left(1 - \psi \right) \mathbf{f} \right] \right\} = 0, \tag{8}$$
$$\varepsilon = \varepsilon(\mathbf{r}) = [1 - n(\mathbf{r})]^2.$$

Обратим внимание на некоторые особенности уравнения (8) по сравнению с уравнением (6). Во-первых, при отсутствии внешнего поля равновесное распределение ψ является однородным и совпадает с равновесной концентрацией газа, $\psi(\mathbf{r}) = \psi_0 = m_0 = \text{const}$, в то время как равновесное распределение $m(\mathbf{r}) = m_0[1 - n(\mathbf{r})]$. Во-вторых, при рассмотрении включения с резкой границей уравнение (8) допускает решение в классе непрерывных функций, в то время как для уравнения (6) как распределение $m(\mathbf{r})$, так и его нормальная производная претерпевают скачок на границе включения. Будем рассматривать включение в виде ограниченного в пространстве, однородного, в общем случае проницаемого кластера со средней концентрацией n_0 :

$$n = n(\mathbf{r}) = \begin{cases} n_0, & |\mathbf{r}| \le R, \\ 0, & |\mathbf{r}| > R, \end{cases}$$
(9)

где *R* — радиус включения.

Нелинейное слагаемое в (8) описывает дрейфовый поток, который отвечает за режим блокады частиц газа. Этот нелинейный эффект существенен вблизи включения. Вдали от включения распределение $\psi(\mathbf{r})$ должно слабо отличаться от равновесного $\psi_0 = m_0$. Последнее позволяет представить решение $\psi(\mathbf{r}) \approx \psi_0 + \delta \psi(\mathbf{r})$ как малое отклонение $\delta \psi(\mathbf{r})$ от равновесного распределения ψ_0 . Здесь мы воспользуемся этим приближением, чтобы качественно описать асимптотическое поведение распределения плотности газа вдали от включения, понимая, что приближение линейного дрейфового потока приводит к неверным результатам вблизи самого включения. Заметим, что это линейное приближение «работает» тем лучше, чем меньше размер включения. При увеличении размера включения усиливается накопление частиц газа перед ним, т.е. усиливается эффект блокады.

Линеаризуя уравнение (8), пренебрегая слагаемым с $\delta\psi^2,$ приходим к уравнению

$$\nabla \left[\nabla \delta \psi^{\pm}(\mathbf{r}) - 2\mathbf{q}\delta \psi^{\pm}(\mathbf{r}) - \mathbf{Q}\right] = 0.$$
 (10)

Здесь $\mathbf{Q} = m_0(1-m_0)\mathbf{f}$ и $\mathbf{q} = (1/2-m_0)\mathbf{f}$, а само уравнение описывает возмущение плотности газа внутри ($\delta\psi^-$) и снаружи включения ($\delta\psi^+$) относительно его стационарного распределения ψ_0 . Уравнения (10) дополнены условиями сшивки для $\delta\psi^{\pm}$ на границе включения S:

$$\delta\psi^{+} = \delta\psi^{-},$$

$$\varepsilon^{+} \left[\left(\frac{\partial(\delta\psi)}{\partial\mathbf{n}} \right)^{+} (\mathbf{r}) - 2q_{n}\delta\psi^{+}(\mathbf{r}) - Q_{n} \right] =$$

$$= \varepsilon^{-} \left[\left(\frac{\partial(\delta\psi)}{\partial\mathbf{n}} \right)^{-} (\mathbf{r}) - 2q_{n}\delta\psi^{-}(\mathbf{r}) - Q_{n} \right],$$
(11)

где $\varepsilon^+ = 1$, $\varepsilon^- = (1 - n_0)^2$, $Q_n = (\mathbf{Q}, \mathbf{n_r})$, $q_n = (\mathbf{q}, \mathbf{n_r})$, а $\mathbf{n_r}$ обозначает внешнюю нормаль в точке $\mathbf{r} \in S$. Заметим, что снаружи включения $\psi^+(\mathbf{r}) \equiv m(\mathbf{r})$ и $\psi^+(\mathbf{r} \to \infty) \to m_0$.

Мы начнем с частного случая половинного заполнения ($m_0 = 1/2$), когда удается выписать решение (10) в явном виде. В этом случае второе слагаемое в (10) исчезает ($\mathbf{q} = 0$), а задача формально сводится к стандартной электростатической задаче о диэлектрической частице в постоянном поле $\mathbf{Q} = \mathbf{f}/4$:

$$\nabla \left[\nabla \delta \psi^{\pm}(\mathbf{r}) - \mathbf{Q} \right] = 0.$$
 (12)

Распределение плотности $\delta\psi(\mathbf{r})$ аналогично распределению электростатического потенциала, характеризующего рассеянное поле, и в двумерном случае имеет вид

$$\psi^{\pm}(r,\vartheta) = \frac{1}{2} - \lambda \frac{|\mathbf{f}|}{4} \left(\frac{R}{r}\right)^{\pm 1} \cos\vartheta, \qquad (13)$$

где функция

$$\lambda(n_0) = \frac{1 - (1 - n_0)^2}{1 + (1 - n_0)^2} \tag{14}$$

учитывает зависимость амплитуды возмущения от «прозрачности» включения ($0 \le \lambda \le 1$), а ϑ есть угол между векторами **f** и **r**.

Как видно из формулы (13), при равновесной концентрации газа $m_0 = 1/2$, форма следа отличается от привычной. Область повышенной плотности газа пред включением и область разрежения позади него являются симметричными, а их профиль имеет степенную асимптотику: $\delta\psi(r, 0) = -\delta\psi(r, \pi) \sim r^{-1}$. Данный результат согласуется с численными результатами, полученными для решеточного газа в приближении среднего поля (см. рис. 16), и объясняет как протяженный характер так и симметрию хвоста «вперед/назад» в случае полузаполненной среды. В общем случае, когда $m_0 \neq 1/2$, приближение линейного дрейфового потока (уравнение (10)) позволяет качественно описать концентрационное переключение асимптотик, а также асимметрию возмущения плотности газа перед и за включением, рис. 1*a, в.* Уравнение (10) можно упростить, представив решение в виде

$$\delta\psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r})e^{\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}},\tag{15}$$

где функция $\varphi(\mathbf{r})$ внутри и снаружи включения удовлетворяет уравнению Гельмгольца

$$(\nabla^2 - q^2)\varphi^{\pm}(\mathbf{r}) = 0 \tag{16}$$

и условиям сшивки на поверхности включения S:

$$\varphi^{+} = \varphi^{-}, \qquad \varepsilon^{+} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \right)^{+} (\mathbf{r}) - q_{n} \varphi^{+} (\mathbf{r}) \right] - \varepsilon^{-} \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \right)^{-} (\mathbf{r}) - q_{n} \varphi^{-} (\mathbf{r}) \right] = Q_{n} (\varepsilon^{+} - \varepsilon^{-}) e^{-\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \tag{17}$$

Нам будет удобно перейти от уравнений (16) и (17) к интегральному уравнению, воспользовавшись методом вторичных поверхностных источников [47–49]. Для этого представим решение уравнения (16) в виде потенциала простого слоя:

$$\varphi(\mathbf{r}) = \int_{S} G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)\rho(\mathbf{r}') \, d\mathbf{r}', \qquad (18)$$

где $G(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ — функция Грина уравнения (16), а $\rho(\mathbf{r}')$ — индуцированная плотность на поверхности включения S, интегральное уравнение для которой определяется условиями сшивки (17) и в компактном виде может быть записано как

$$(\lambda - 1)\rho(\mathbf{r}) + 2\lambda \left[\left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{n}} \right)^+ (\mathbf{r}) - q_n(\mathbf{r})\varphi(\mathbf{r}) \right] = \\ = 2\lambda Q_n(\mathbf{r})e^{-\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \quad (19)$$

где $\mathbf{r} \in S$, $\varphi(\mathbf{r})$ определяется выражением (18), а λ выражением (14). При выводе (19) мы воспользовались теоремой о скачке нормальной производной потенциала простого слоя [47]:

$$\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}}\right)^{\pm}(\mathbf{r}) = \mp \frac{1}{2}\rho(\mathbf{r}) + \frac{\partial\varphi}{\partial\mathbf{n}}(\mathbf{r}).$$
(20)

Представление решения $\varphi(\mathbf{r})$ в виде (18) позволяет качественно судить об асимптотическом поведении

распределения $\psi(\mathbf{r})$ вдали от включения. Ограничившись рассмотрением двумерного случая и круговой формой включения радиуса R, распределение $\psi(\mathbf{r}) = m_0 + \delta \psi(\mathbf{r})$ с учетом (15) и (18) можно записать как

$$\psi(\mathbf{r}) = m_0 + \frac{1}{2\pi} e^{\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \int\limits_S K_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r'}|) \rho(\mathbf{r'}) \, d\mathbf{r'}.$$
 (21)

Здесь $K_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)/2\pi$ — модифицированная функция Бесселя, которая является двумерной функцией Грина уравнения (16). В полярной системе координат с учетом симметрии задачи поверхностную плотность можно представить в виде разложения

$$\rho(\vartheta) = \sum_{n=0}^{\infty} C_n \cos n\vartheta, \qquad (22)$$

где ϑ — угол между **r** и направлением тянущего поля **f**, а C_n — константы разложения, которые подчиняются системе уравнений (см. Приложение):

$$(1 + \delta_{n,0}) \left[(\lambda - 1) I_n^{-1}(z) + 2\lambda z K'_n(z) \right] \alpha_n - \lambda \beta z \left[(1 + \delta_{n,0}) K_{n+1}(z) \alpha_{n+1} + (1 - \delta_{n,0} + \delta_{n,1}) K_{n-1}(z) \alpha_{n-1} \right] = 4 |\mathbf{Q}| \lambda (-\beta)^{n-1} I'_n(z), \quad (23)$$

где z = qR, $\alpha_n = I_n(z)C_n$, $I_n(z)$ и $K_n(z)$ — модифицированные функции Бесселя, а штрих обозначает производную по аргументу z. Параметр $\beta =$ $= (1/2 - m_0)/|1/2 - m_0|$ принимает значения +1 и -1 при равновесных плотностях соответственно $m_0 <$ < 1/2 и $m_0 > 1/2$.

Используя разложение (22) и теорему сложения для функций Бесселя [50], распределение концентрации (21) снаружи включения, $\psi^+(\mathbf{r}) \equiv m(\mathbf{r})$, можно представить в виде

$$m(r,\vartheta) = m_0 + e^{\beta q r \cos \vartheta} R \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n K_n(qr) \cos n\vartheta. \quad (24)$$

Вдали от включения, когда $qr \gg 1$, можно воспользоваться асимптотическим разложением для функций Бесселя, см. [50],

$$K_n(qr) \approx \sqrt{\frac{\pi}{2qr}} e^{-qr} \left(1 + \frac{4n^2 - 1}{8qr} + \dots \right), \quad (25)$$

с учетом которого выражение (24) принимает вид

$$m(r,\vartheta) \approx m_0 + e^{-qr(1-\beta\cos\vartheta)} \sqrt{\frac{\pi}{2}} R \times \\ \times \sum_{n=0} \alpha_n \left[(qr)^{-1/2} + \frac{4n^2 - 1}{8} (qr)^{-3/2} + \cdots \right] \times \\ \times \cos n\vartheta. \quad (26)$$

Из выражения (26) непосредственно следует, что за переключение асимптотик при изменении равновесной концентрации m_0 отвечает экспоненциальный множитель. При значении $m_0 < 1/2$ ($\beta = 1$) позади включения ($\vartheta = 0$) показатель экспоненты становится равным нулю и характерное поведение определяется степенной асимптотикой, в то время как перед включением ($\vartheta = \pi$) поведение будет экспоненциальным, т.е. при низкой равновесной плотности форма профиля соответствует стандартной. Если же $m_0 > 1/2$ ($\beta = -1$), профиль возмущения будет характеризоваться экспоненциально коротким «хвостом» позади включения и протяженным «хвостом вперед» перед включением с характерной степенной асимптотикой. Таким образом, инверсия хвоста «вперед/назад», которая была проиллюстрирована численно (рис. 1), сопровождается «переключением» асимптотических режимов: при повышении равновесной плотности среды характерное асимптотическое поведение профиля позади включения переключается со степенного на экспоненциальное непрерывным образом, а перед включением — в обратном порядке.

Амплитуда профиля возмущения в (26) удовлетворяет очевидному требованию $m(r, \vartheta = 0) < m_0$ и $m(r, \vartheta = \pi) > m_0$, что отражает наличие разреженной области за включением и относительно более плотной перед ним, соответственно с направлением поля. За изменение знака второго слагаемого в формуле (26) отвечает множитель $\cos n\vartheta$. Здесь мы ограничимся простым предельным случаем $\lambda \to 1$ (что соответствует почти непроницаемому включению с $n_0 \rightarrow 1$) и двумя слагаемыми разложения (22), $\rho(\vartheta) \approx C_0 + C_1 \cos \vartheta$. В этом случае система (23) существенно упрощается и вычисление коэффициентов α_0 и α_1 не представляет трудностей. В этих приближениях профиль перед ($\vartheta = \pi$) и за включением $(\vartheta = 0)$, например, для случая $m_0 < 1/2 \ (\beta = 1)$, можно записать в виде

$$m(r, \vartheta = 0) \approx m_0 - A \left\{ K_1(z)I_2(z)(qr)^{-1/2} + \left[\frac{1}{2z} + \frac{3}{8}K_1(z)I_2(z)\right](qr)^{-3/2} \right\}, \quad (27)$$

$$m(r, \vartheta = \pi) \approx$$

$$\approx m_0 + Ae^{-2qr} \left\{ \left[\frac{2}{z} + K_1(z)I_2(z) \right] (qr)^{-1/2} + \left[\frac{1}{4z} + \frac{3}{8}K_1(z)I_2(z) \right] (qr)^{-3/2} \right\}, \quad (27')$$



Рис.2. Поведение профиля $\delta m(x,y=0)$. Сплошная линия соответствует численному решению (приближение среднего поля), а штриховая — асимптотическому решению (длинноволновое приближение) при $m_0 = 0.1$, $|\mathbf{f}| = 0.5$ и R = 0.5; наклон прямых на вложенном графике соответствует показателю асимптотики -3/2 при $x \gg 1$

$$A = \frac{\sqrt{2\pi}m_0(1-m_0)|\mathbf{f}|R}{zK_1(z)K_2(z)}.$$

Из формул (27) и (27') непосредственно следует, что изменение знака амплитуды возмущения плотности δm соответствует направлению внешней силы, т.е. область разрежения возникает позади включения, см. рис. 2. В предельном случае малого радиуса включения, $z \ll 1$, асимптотика следа разрежения позади него ведет себя как $-\sqrt{\pi}m_0(1-m_0)|\mathbf{f}|qR^2(2qr)^{-3/2}$ и неплохо согласуется с численными результатами для точечного включения, рис. 2. Заметим, что полученная нами асимптотика, пропорциональная $r^{-3/2}$, также совпадает с асимптотикой затухания следа, вызванного движением пробной частицы в решеточном газе, представленной в работе [15]. Однако в последнем случае концентрационного переключения следа не наблюдается [15, 20].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Используя модель решеточного газа, в данной работе мы показали, что при наличии короткодействующих межчастичных корреляций в газе диффузионный след (возмущение плотности), создаваемый движущимся включением, и след, возникающий при обтекании неподвижного включения потоком газа, могут принципиально различаться. В первом случае, когда включение движется в газе под действием тянущего внешнего поля, след имеет привычную структуру (см. [25–27]): локализованная область повышенной плотности газа перед включением и протяженный хвост разрежения позади него. Такая структура следа слабо зависит от равновесной концентрации газа [15, 20] и возмущение среды, характеризующее долговременную память о прохождении включения, направлено назад, в виде хвоста разрежения.

Во втором случае, когда тяжелое включение находится в потоке газа, вызванного тянущим полем, в системе наблюдается концентрационный переход. При низких равновесных концентрациях газа $(m_0 < 1/2)$ след имеет привычную структуру с протяженным хвостом разрежения позади включения. При высокой концентрации $(m_0 > 1/2)$ происходит инверсия следа, который характеризуется протяженной областью повышенной плотности газа впереди включения и локализованной областью разрежения позади него. Другими словами, основное возмущение среды будет направлено вперед. Такое переключение вызвано эффектом блокады потока частиц газа, который связан с короткодействующим отталкиванием (на одном узле) между частицами.

Характер возмущения плотности газа, вызванного наличием включений, определяет характер корреляций или диссипативного взаимодействия между ними. Заметим, что переключение направленности следа может, в свою очередь, приводить к изменению знака диссипативного взаимодействия между включениями, например, с эффективного притяжения на отталкивание, что непосредственно следует из симметрии задачи (3)-(5). Качественно изменение знака эффективного взаимодействия можно показать, рассмотрев два сферически симметричных включения, расположенных в точках $\mathbf{r}_1 = (0, y_0)$ и $\mathbf{r}_2 = (0, -y_0)$, полагая, что поле **f** направлено вдоль оси х. Сила, действующая на включение, которое описывается потенциалом $\varphi(\mathbf{r})$, вызванная возмущением плотности газа $\delta \rho(\mathbf{r})$, имеет вид $\mathbf{F} = \int \delta \rho \nabla \varphi \, d\mathbf{r}$, см. [12, 24]. Роль потенциала $\varphi(\mathbf{r})$ в нашем случае играет распределение $n(\mathbf{r})$. Тогда *у*-компоненту силы $F_{1y}(m_0)$, действующей на первое включение со стороны газа с равновесной концентрацией m_0 , с учетом (5), можно представить в виде

$$F_{1y}(m_0) = \int \delta m(\mathbf{r}, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; m_0) \frac{\partial}{\partial y} \varphi_1(\mathbf{r}) \, d\mathbf{r} =$$
$$= -F_{1y}(1 - m_0). \quad (28)$$

Такое «переключение» характера взаимодействия может быть определяющим фактором, например,

при формировании диссипативных структур в ансамбле включений. Данный эффект представляет самостоятельный интерес.

Переключение следа, полученное численно для решеточного газа в приближении среднего поля, разд. 3, характеризуется переключением режимов асимптотического поведения профиля вдали от включения. Последнее было продемонстрировано помощью длинноволнового приближения (8) и приближения линейного потока (10). Данные приближения позволяют качественно описать переключение как непрерывный переход от степенного характера затухания возмущения плотности газа, характеризующего протяженную часть следа, экспоненциальному, характеризующему локализованную область, «схлопывание» следа при изменении концентрации. Линейное приближение хорошо описывает асимптотическое поведение следа в случае малых размеров включения и неплохо согласуется с численными расчетами (рис. 2), а также совпадает с результатами, полученными для асимптотики следа, создаваемого движущимся в решеточном газе включением [15]. В случае большого размера включения линейное приближение дает лишь качественное согласие и неприменимо вблизи самого включения. Последнее связано с усилением режима блокады частиц газа и доминированием нелинейного слагаемого в уравнении (8).

Кроме того, использование приближения среднего поля и пренебрежение флуктуациями в решеточном газе приводит к потере информации о быстрых процессах в системе. Как следствие, мы пренебрегаем мелкомасштабными корреляциями, которые могут быть существенны вблизи включения, см., например, [19, 20, 34]. Заметим также, что в данных приближениях нельзя описать, например, эффекты спаривания для точечных включений [25], или флуктуационное взаимодействие между ними [44–46].

В заключение отметим, что рассмотренная нами модель имеет приложение не только к броуновскому газу со взаимодействием, миграции легких и тяжелых адсорбированных атомов на поверхности твердого тела [39, 40] или автомобильным пробкам [29, 35, 36], модель также применима для описания формирования ледовых заторов во время ледохода, которые вызваны наличием препятствия, например, отмели или опоры моста. Из полученных результатов непосредственно следует, что при концентрации льдин выше критической перед препятствием может возникать протяженный ледовый затор. Авторы хотят выразить искреннюю благодарность П. М. Томчуку, А. А. Чумаку, В. В. Елисеевой и Т. Черному за внимание к работе и критические замечания.

приложение

Получение системы алгебраических уравнений (23)

Коэффициенты C_n или $\alpha_n = I_n(z)C_n$ определяются из интегрального уравнения (19). В полярной системе координат, связанной с центром включения, оно имеет вид

$$(\lambda - 1)\rho(\vartheta) + \frac{\lambda R}{\pi} \left[\frac{\partial}{\partial r} \Big|_{r \to R+0} - q\beta \cos \vartheta \right] \times \\ \times \int_{-\pi}^{\pi} K_0(qr, qR, \vartheta - \vartheta')\rho(\vartheta') \, d\vartheta' = \\ = 2\lambda |\mathbf{Q}| \cos \vartheta e^{-\beta qR \cos \vartheta}.$$
(29)

Решение $\rho(\vartheta)$ уравнения (29) представим в виде (22), а для ядра уравнения воспользуемся теоремой сложения для функций Бесселя [50], представив его в виде

$$K_0\left(\sqrt{(qR)^2 + (qr)^2 - 2Rrq^2\cos(\vartheta - \vartheta')}\right) = \sum_{n=0}^{\infty} (2 - \delta_{n,0})I_n(qR)K_n(qr)\cos n(\vartheta - \vartheta') \quad (30)$$

при r > R (с последующим взятием предела $r \to R + 0$). В правой части используется разложение [50]

$$e^{-\beta qR\cos\vartheta} = \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\beta\right)^n \left(2 - \delta_{n,0}\right) I_n(qR)\cos n\vartheta. \quad (31)$$

Вычисляя матричные элементы, из уравнения (29) получим систему линейных уравнений (23).

ЛИТЕРАТУРА

- 1. Lord Kelvin, Philos. Mag. Ser. 6 9, 733 (1905).
- 2. Г. Биркгоф, Э. Сарантонелло, Струи, следы и каверны, Мир, Москва (1964).
- **3.** G. K. Batchelor, An Introduction to Fluid Dynamics, Cambridge University Press, New York (2000).
- 4. Г. Лэмб, *Гидродинамика*, Гостехиздат, Москва (1947).

- A. Couairon and A. Mysyrowicz, Phys. Rep. 441, 47 (2007).
- 6. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Электродинамика сплошных сред, Наука, Москва (1982).
- V. Démery and D. S. Dean, Phys. Rev. Lett. 104, 080601 (2010).
- 8. Ю. Г. Гладуш, А. М. Камчатнов, ЖЭТФ 132, 589 (2007).
- A. M. Kamchatnov and L. P. Pitaevskii, Phys. Rev. Lett. 100, 160402 (2008).
- 10. В. А. Миронов, А. И. Смирнов, Л. А. Смирнов, ЖЭТФ 137, 1004 (2010).
- D. C. Roberts and Y. Pomeau, Phys. Rev. Lett. 95, 145303 (2005).
- 12. Д. Пайнс, Ф. Нозьер, Теория квантовых жидкостей, Мир, Москва (1967).
- Д. Форстер, Гидродинамические флуктуации, нарушенная симметрия и корреляционные функции, Атомиздат, Москва (1980).
- 14. O. Bénichou, A. M. Cazabat, M. Moreau, and G. Oshanin, Physica A 272, 56 (1999).
- O. Bénichou, A. M. Cazabat, J. De Coninck, M. Moreau, and G. Oshanin, Phys. Rev. Lett. 84, 511 (2000).
- O. Bénichou, J. Klafter, M. Moreau, and G. Oshanin, Phys. Rev. E 62, 3327 (2000).
- 17. O. Bénichou, A. M. Cazabat, J. De Coninck, M. Moreau, and G. Oshanin, Phys. Rev. B 63, 235413 (2001).
- J. De Coninck, G. Oshanin, and M. Moreau, Eur. Phys. Lett. 38, 527 (1997).
- O. Bénichou, C. Mejía-Monasterio, and G. Oshanin, Phys. Rev. E 87, 020103 (2013).
- O. Bénichou, P. Illien, C. Mejía-Monasterio, and G. Oshanin, J. Stat. Mech. 2013, P05008 (2013).
- 21. D. Frydel and H. Diamant, Phys. Rev. Lett. 104, 248302 (2010).
- 22. B. U. Felderhof, J. Chem. Phys. 134, 024505 (2011).
- O. V. Kliushnychenko and S. P. Lukyanets, Eur. Phys. J. Special Topics 216, 127 (2013).
- 24. J. Dzubiella, H. Löwen, and C. Likos, Phys. Rev. Lett. 91, 248301 (2003).
- C. Mejía-Monasterio and G. Oshanin, Soft Matter 7, 993 (2011).

- 26. A. S. Khair and J. F. Brady, Proc. R. Soc. A 463, 223 (2007).
- 27. I. Sriram and E. M. Furst, Soft Matter 8, 3335 (2012).
- 28. J. Cividini and C. Appert-Rolland, J. Stat. Mech. 2013, P07015 (2013).
- 29. K.-T. Leung and R. K. P. Zia, Phys. Rev. E 56, 308 (1997).
- 30. B. Schmittmann and R. K. P. Zia, Statistical Mechanics of Driven Diffusive Systems, Academic Press, London (1995).
- 31. P. Argyrakis, A. A. Chumak, M. Maragakis, and N. Tsakiris, Phys. Rev. B 80, 104203 (2009).
- 32. A. L. Efros, Phys. Rev. B 78, 155130 (2008).
- 33. S. P. Lukyanets and O. V. Kliushnychenko, Phys. Rev. E 82, 051111 (2010).
- 34. R. A. Tahir-Kheli and R. J. Elliott, Phys. Rev. B 27, 844 (1983).
- 35. B. Schmittmann, K. Hwang, and R. K. P. Zia, Europhys. Lett. 19, 19 (1992).
- 36. R. S. Hipolito, R. K. P. Zia, and B. Schmittmann, J. Phys. A: Math. Gen. 36, 4963 (2003).
- 37. Э. С. Гюльназаров, В. В. Обуховский, Т. Н. Смирнова, Опт. и спектр. 69, 178 (1990).
- 38. G. M. Karpov, V. V. Obukhovsky, T. N. Smirnova, and V. V. Lemeshko, Opt. Comm. 174, 391 (2000).

- 39. A. A. Chumak and A. A. Tarasenko, Surf. Sci. 91, 694 (1980).
- 40. А. А. Тарасенко, П. М. Томчук, А. А. Чумак, Флуктуации в объеме и на поверхности твердых тел, Наукова думка, Киев (1992).
- 41. Д. Н. Зубарев, Неравновесная статистическая термодинамика, Наука, Москва (1971).
- 42. K-T. Leung, Phys. Rev. Lett. 73, 2386 (1994).
- 43. P. M. Richards, Phys. Rev. B 16, 1393 (1977).
- 44. D. S. Dean and A. Gopinathan, Phys. Rev. E 81, 041126 (2010).
- 45. V. Démery and D. S. Dean, Phys. Rev. E 84, 010103 (2011).
- 46. A.-F. Bitbol and J.-B. Fournier, Phys. Rev. E 83, 61107 (2011).
- 47. В. С. Владимиров, Уравнения математической физики, Наука, Москва (1981).
- 48. О. В. Тозони, И. Д. Маергойз, Расчет трехмерных электромагнитных полей, Техніка, Киев (1974).
- 49. I. D. Mayergoyz, D. R. Fredkin, and Zh. Zhang, Phys. Rev. B 72, 155412 (2005).
- **50**. М. Абрамовиц, И. Стиган, Справочник по специальным функциям, Наука, Москва (1979).