

Российская Академия Наук
Институт Теоретической Физики им. Л.Д. Ландау

На правах рукописи

Турицын Константин Сергеевич

**Статистика полей и макромолекул в случайных
потоках**

01.04.02 – Теоретическая и математическая физика

Руководитель

д. ф.-м. н., проф.

Лебедев Владимир Валентинович

Черноголовка

2007

Содержание

Введение	2
Глава 1. Динамика полимерных молекул	8
1.1. Модели полимера и внешнего потока	8
1.2. Качественный анализ	10
1.3. Полимер в стационарном поле скорости	13
1.4. Полимер в случайных потоках	16
1.5. Статистика ориентаций полимер	17
1.6. Функция распределения времен проворотов	25
1.7. Растяжение полимера	30
Глава 2. Производство энтропии в линейных системах	42
2.1. Конфигурационная энтропия	42
2.2. Производство энтропии полимером во внешнем потоке	44
2.3. Производство термодинамической энтропии	47
Глава 3. Пассивный скаляр в приграничной области	49
3.1. Модельные предположения	51
3.2. Статистика среднего значения скаляра	58
3.3. Высшие моменты пассивного скаляра	62
3.4. Парная корреляционная функция	65
3.5. Затухание скаляра в трубе	67
Заключение	72
Приложение А. Уравнение на парный коррелятор	75
Литература	78

Введение

Исследования динамики и статистики пассивных (то есть не оказывающих обратного влияния на жидкость) объектов во внешних потоках представляют собой одну из бурно развивающихся областей науки, находящуюся на стыке гидродинамики и статистической физики. Разнообразие систем, исследуемых в рамках этого направления чрезвычайно велико: круг задач включает в себя как биологические процессы, происходящие внутри организмов, так и поведение крупномасштабного магнитного поля, размещаемого межгалактическими потоками. Несмотря на все различия, многие из них могут быть изучены в рамках математически близких подходов.

Развитие экспериментальных технологий сделало возможным осуществлять прямые наблюдения отдельных макромолекул, находящихся во внешних стационарных или хаотических/турбулентных потоках [1–16]. Подобные наблюдения представляют огромный интерес для приложений, связанных с полимерной [17] или биологической физикой [14]. Они позволили существенно улучшить понимание как динамических свойств биомолекул (см. например работы [2, 3, 5, 6, 10, 12–16] по изучению свойств молекул ДНК), так и механизмов взаимодействия белков с другими макромолекулами [1, 7, 11]. Параллельно с экспериментами развивались и теоретические модели, описывавшие поведение макромолекул во внешних потоках. Наиболее серьезных результатов на этом пути удалось добиться группе Стивена Чу. В работах [3–6, 8, 9, 12, 14] путем прямых численных симуляций моделировалось поведение отдельных полимерных макромолекул в сдвиговых потоках. Теоретическое исследование статистики ориентаций и конформаций подобных молекул представлено в работах [18, 19].

Развитие экспериментальных методов также позволило осуществлять прямые наблюдения флуктуаций в микроскопических неравновесных системах. Описание статистических свойств неравновесных систем представляет собой

широкий и тяжелый круг задач, которые не могут быть решены в рамках какого-либо универсального подхода. Эти задачи давно привлекают внимание ученых, и одним из наиболее существенных достижений последних лет в этой области было доказательство флуктуационной теоремы, связывающей вероятности производства положительной и отрицательной энтропии в системе [20–24]. Эта теорема была успешно подтверждена экспериментально для ряда неравновесных систем с сильными флуктуациям: для дрейфующих коллоидных частиц [25], для электрических цепей [26], для растягиваемых полимерных молекул [27]. На основе следствия из флуктуационной теоремы, соотношения Жарзинского был предложен метод исследования механических свойств полимерных молекул или белков, в котором равновесные характеристики, такие как свободная энергия изучаются в существенно неравновесных экспериментах [28–32]. Флуктуационная система позволила сформулировать ряд предсказаний по статистике флуктуаций для большого круга систем, например для объектов взаимодействующих с двумя различными термостатами [33–35], биологических молекулярных моторов [36, 37], систем с непрерывно протекающими химическими реакциями [38].

В 2000 году было открыто явление, получившее название “Эластической турбулентности” [39, 40]. Было показано, что в разбавленных растворах полимерных молекул (с концентрацией полимеров на уровне 25 ppm) может возбуждаться хаотический поток при исчезающе малых числах Рейнольдса. Большое внимание к этому явлению обусловлено как его потенциальными приложениями (хаотический поток возникающий при малых числах Рейнольдса идеально подходит для задач перемешивания микроскопических объемов растворов), так и его значимостью с точки зрения фундаментальной физики. Хаотические потоки, возникающие в эластической турбулентности, с точки зрения статистики, кардинально отличаются от потоков, наблюдаемых в обычных турбулентных течениях, и поэтому теория, описывающая их свойства представляет собой от-

дельную, новую область гидродинамики. Поведение полимеров в случайных потоках активно изучалось еще со второй половины 20го века, когда было обнаружено, что свойства турбулентных течений сильно меняются при добавлении в нее небольшого количества полимера [41]. Этот эффект активно используется в индустрии, но до сих пор не построено никакой количественной теории, описывающей его, существуют только качественные объяснения [42]. В работах [43, 44] рассматривалось поведение отдельных полимерных молекул в статистически изотропных случайных потоках, и показано, что в такой системе может наблюдаться так называемый *coil-stretch* переход, когда при изменении силы потока кардинально меняется структура функции распределения полимера по длинам: при слабых потоках большую часть времени полимер проводит в свернутом состоянии, в то время как в сильных большую часть времени он оказывается вытянут. Эффект эластической турбулентности был рассмотрен в теоретических работах [45–47], в которых эластические неустойчивости также связывались с *coil-stretch* переходом.

Проблема перемешивания растворов во внешних потоках привлекала повышенное внимание как из-за ее фундаментального значения, так и благодаря многочисленным прикладным приложениям. Скорость перемешивания примесей во внешних течениях сильно зависит от типа гидродинамического потока, возбужденного в жидкости. В последние годы теоретикам удалось существенно продвинуться в изучении стохастических моделей поля скорости, использовавшиеся для описания поведения пассивных объектов в турбулентных и хаотических полях [48, 49]. В рамках этих моделей было, в частности, изучено размешивание пассивных скалярных полей, к которым можно отнести концентрации разбавленных растворов или поле слабых флуктуаций температуры. Отличительной особенностью размешивания пассивного скаляра вблизи границ сосуда является гладкость поля скорости в этой области. Размешивание пассивного скаляра в гладких полях скорости было впервые рассмотрено в работах Батчелора

[50] и Крайчнана [51–53], в которых были соответственно рассмотрены случаи полей с большим и малым временем корреляции. Обобщение на произвольное время корреляции было представлено в работе [54]. Во всех этих работах рассматривался неограниченный поток, и скаляр со стационарной статистикой, которая возникала в результате установления равновесия между процессами накачки и диффузии. Свойства распада пассивного скаляра в неограниченных потоках также хорошо известны. В работе [55] показано, что в инерционном интервале затухание скаляра описывается степенными законами. Помимо этого изучалась задача о затухании скаляра в вязком интервале масштабов, внутри которого поле скорости может считаться гладким (см. например [56]). В работах [57, 58] показано, что в этом случае распад происходит экспоненциально быстро. Подобный анализ также применим и к потокам, возникающим в эластической турбулентности. В работе [59] рассматривался общий случай, в котором учитывались как инерционный, так и вязкий интервал. В этом случае распад пассивного скаляра определяется в основном вихрями из инерционного интервала и описывается, таким образом, степенным законом.

В диссертации исследуются определенные задачи возникающие в контексте эффектов, описанных выше.

В первой главе рассмотрено поведение полимера во внешних потоках со средней сдвиговой компонентой. Такая задача естественно возникает в экспериментах по эластической турбулентности. В наших исследованиях мы не учитываем обратную реакцию полимера на поток, а изучаем динамику пассивного полимера. Используется простая модель, позволяющая описывать динамику полимерной молекулы в хаотических и стационарных полях скорости со средней сдвиговой компонентой. Представлено качественное описание поведения полимера, в частности явления *tumbling*. Рассмотрены две модели хаотической компоненты внешнего потока, одна из которых соответствует случайному полю общего положения, а другая предполагает изотропную, дельта-коррелированную

статистику случайной компоненты потока. Для задачи со стационарным потоком найдена полная функция распределения состояния полимера, описывающая одновременную статистику как его длины, так и ориентации. Исследована зависимость формы функции распределения от числа Вайссенберга, характеризующего относительную мощность внешнего потока. В случае хаотического внешнего потока сначала изучается функцию распределения углов ориентации полимера относительно плоскости сдвиговой компоненты. Показано, что функция распределения угла ϕ (отвечающего за ориентацию полимера внутри плоскости сдвиговой компоненты) асимметрична, и сконцентрирована в области углов $\phi \sim \phi_t \ll 1$. Найдены универсальные асимптотика функции распределения P_ϕ , связанная с детерминистской динамикой полимера: $P_\phi \sim \sin^{-2} \phi$. Для модели с дельта-коррелированной компонентой поля скорости получено точное выражение для функции распределения P_ϕ . Далее, рассматривается функцию распределения угла θ , связанного с отклонением полимера от плоскости сдвигового потока. Показано, что основное тело функции распределения сконцентрировано в области $|\theta| \sim \phi_t$, а асимптотики соответствующие большим отклонениям состоят из двух вкладов: детерминистского $P_\theta \sim \theta^{-2}$ и стохастического $P_\theta \sim \theta^{-a}$, в котором константа a не универсальна и зависит от функции Крамера, связанной со статистикой поля скорости. Также показано, что функция распределения времен проворота полимера T имеет пик в области $T \sim (s\phi_t)^{-1}$, где s - амплитуда сдвиговой компоненты поля скорости. Найдены асимптотики функции распределения P_T в случаях $T \gg (s\phi_t)^{-1}$ и $T \ll (s\phi_t)^{-1}$. В конце первой главы исследуется зависимость функции распределения длины полимера $P(R)$ от числа Вайссенберга. Показано, что при разных значениях этого параметра может наблюдаться по крайней мере три качественно разных формы $P(R)$. В каждой из этих ситуаций исследованы асимптотические поведения, соответствующие разным областям.

Во второй главе изучается статистика производства энтропии полимером,

находящимся во внешнем стационарном потоке. Введено два типа энтропии - конфигурационная и термодинамическая, и показано, что функция распределения величины произведенной энтропии при больших временах принимает форму, предсказываемую теорией больших отклонений. Предложено два метода вычисления функции Крамера, входящей в функцию распределения, и показано, что в случае планарных потоков выполняется флуктуационная теорема, накладывающая определенные ограничения на асимптотики функции Крамера.

В третьей главе рассматривается задача размешивания пассивного скаляра хаотическими и турбулентными потоками в приграничной области. Подобная задача также мотивирована экспериментами по эластической турбулентности, а также работами [59, 60], в которых было показано, что размешивание скаляра происходит особенно медленно вблизи границ сосудов. Исследуются две принципиально разные ситуации: распадная, соответствующая например размешиванию поля концентрации примесей. В этом случае динамика скаляра является существенно нестационарной. Примером второй ситуации является размешивание поля температур. В этом случае статистика скаляра может быть описана квазистационарным распределением. В обоих случаях исследуются средние высокие моменты пассивного скаляра, поведение которых будет указывать на сильную перемежаемость в системе. Выведено уравнение на парную корреляционную функцию и вычислим одноточечную функцию распределения пассивного скаляра. В конце главы большинство результатов обобщается также на систему, в которой размешивание происходит в трубе с хаотическим потоком. Подобная система использовалась в экспериментах [61].

Глава 1

Динамика полимерных молекул

В этой главе изучается поведение полимерной молекулы во внешних потоках со средней сдвиговой компонентой. Рассмотрены случаи стационарных и случайных потоков, вычислены различные функции распределения, характеризующие статистические свойства динамики. В частности, проанализированы функции распределения углов ориентации полимера, его длины, времени проворота в плоскости сдвигового потока.

1.1. Модели полимера и внешнего потока

В литературе использовалось большое количество моделей, позволяющих описывать поведение макромолекул, находящихся под воздействием внешних сил или погруженных во внешние потоки. Большинство из этих моделей достаточно сложны, поэтому используются либо в численных симуляциях, либо для аналитических вычислений равновесных свойств полимеров. Поскольку в этой работе изучается сильно неравновесная стохастическая динамика полимера, в качестве базовой модели выбрана так называемая “гантельная” (*dumbbell*) модель полимера. В рамках этой модели для описания динамики полимера используется только одна основная мода, отвечающая растяжению молекулы. Формально, в рамках этой модели полимер представляет собой два груза, соединенных в общем случае нелинейной пружиной. Динамика отдельных грузов определяется из баланса трех сил: Стоксового сопротивления со стороны внешней жидкости, силы натяжения пружины (которая приводит к релаксации полимера) и Ланжевеновских сил, имеющих тепловую природу, и обеспечивающих правильный равновесный размер полимера. Поскольку в экспериментах характерное число Рейнольдса, связанное с динамикой полимера исчезающе мало,

можно пренебречь инерционными эффектами. Поэтому, основное уравнение, описывающее динамику полимерной молекулы имеет следующий вид:

$$\dot{R}_i = \sigma_{ij}R_j - \frac{f(R)}{\tau}R_i + \sqrt{\frac{R_T^2}{3\tau}}\xi_i(t). \quad (1.1)$$

В этом уравнении вектор R_i связывает два противоположных конца полимера, а $\sigma_{ij} = \partial_i v_j$ - матрица градиентов поля скорости. Первый член в правой части уравнения связан с Стоксовыми силами сопротивления со стороны жидкости. При этом используется предположение о том, что на масштабах полимера поле скорости v_i можно считать гладким, что справедливо для всех современных экспериментов. Второй член связан с релаксацией полимера. Время τ называется временем релаксации полимера. Функция $f(R)$ учитывает нелинейные эффекты, не позволяет полимеру растянуться на длину большую максимального значения R_m . Явный ее вид будет обсуждаться ниже, здесь мы отметим, что в области $R \ll R_m$ можно считать $f(R) = 1$, в то время как при $R \rightarrow R_m$ эффективное время релаксации $\tau/f(R)$ стремится к нулю: $\lim_{R \rightarrow R_m} f(R) = \infty$. Наконец, последний член в правой части уравнения (1.1) связан с Ланжевенскими силами. В тепловом равновесии, в отсутствии внешнего потока средне-квадратичное значение длины полимера равно R_T . Функции $\xi_i(t)$ являются независимыми гауссовскими дельта-коррелированными процессами:

$$\langle \xi_i(t)\xi_j(t') \rangle = \delta_{ij}\delta(t - t') \quad (1.2)$$

В дальнейшем мы будем считать, что максимальная длина полимерной молекулы R_m много больше ее равновесного размера: $R_m \gg R_T$. Когда длина полимера приближается к максимальному значению приближение линейной релаксации перестает работать и становится необходимо учитывать нетривиальную зависимость $f(R)$. Наиболее распространенными приближениями, описывающими эту нелинейность являются модель FENE (finitely extensible nonlinear elastic), которая была введена на синтетических полимерных молекул полиэтиленоксида

и полиакриламида [62], а также предложенная недавно модель Марко-Сиджия [63], которая была получена из анализа экспериментов по растяжению молекул ДНК. В рамках этих моделей функция $f(R)$ имеет следующий вид:

$$f_{FENE}(R) = \frac{1}{1 - (R/R_m)^2} \quad (1.3)$$

$$f_{MS}(R) = \frac{2}{3} - \frac{R_m}{6R} + \frac{R_m}{6R(1 - R/R_m)^2} \quad (1.4)$$

Следует отметить, что в предельных случаях $R \ll R_m$ и $|R - R_m| \ll R_m$ обе эти модели демонстрируют одинаковое поведение, поэтому выбор какой-то конкретной модели не влияет на качественные результаты.

1.2. Качественный анализ

Динамика полимерной молекулы, помещенной во внешнее поле скорости сильно зависит от числа Вайссенберга Wi , которое определяется как $Wi = \Lambda\tau$, где Λ - характерный градиент внешнего поля скорости, а τ - время релаксации полимера. В случае достаточно малых значений числа Вайссенберга, полимер проводит большую часть времени в свернутом состоянии, вероятность наблюдения полимера в сильно вытянутом состоянии параметрически задавлена. Однако, в случае $Wi \gtrsim 1$ ситуация становится обратной: большую часть времени длина полимера оказывается близкой к R_m . При этом для любой конкретной реализации внешнего потока существует критическое число Вайссенберга $Wi_c \sim 1$ при котором происходит переход от одного статистического состояния к другому. Этот переход известен как coil-stretch transition, и был впервые предсказан в теоретических работах Де Жена и Хинча [44, 64]. В работе Де Жена рассматривался стационарный гиперболический поток для которого $\partial_x v_y = -\partial_y v_x = \Lambda$. Анализируя уравнение (1.1) нетрудно убедиться, что в этом случае переход происходит при $Wi_c = \Lambda\tau = 1$. Экспериментальные наблюдения coil-stretch перехода были впервые представлены в работах [65, 66] в которых изучались

реологические свойства полимерных растворов. Прямые наблюдения coil-stretch перехода были осуществлены группой Стивена Чу [67], которые изучали поведение отдельных молекул ДНК в гиперболических потоках. Динамика полимера в хаотических потоках изучалась в работах [42, 43, 45, 46], где было также предсказано существование критического числа Вайссенберга $Wi_c = \lambda\tau = 1$, где λ - это среднее значение ляпуновской экспоненты, характеризующий случайный поток. Экспериментально coil-stretch переход в случайных течениях был зарегистрирован в работах Геращенко и Штайнберга [15].

Поведение макромолекул в сдвиговых потоках привлекало особое внимание исследователей поскольку подобные потоки наблюдаются в естественных условиях вблизи стенок сосудов. Большая сдвиговая компонента присутствует в потоках жидкости, используемых для реологических экспериментов, она же является необходимым атрибутом для возбуждения эластической турбулентности. Полимер, помещенный в поток с сильной сдвиговой компонентой вытягивается в направлении потока. При этом в случае стационарного течения положение равновесия полимера (соответствующего молекуле, растянутой параллельно направлению потока) является не устойчивым. Поэтому любые внешние возмущения, например тепловые шумы или флуктуации поля скорости приводят к выводу полимера из положения равновесия, его дальнейшему прокручиванию на угол π . Движение полимера, состоящие из вытягиваний вдоль направления потока, и последующих аperiodически повторяющихся прокручиваний известно в литературе под термином *tumbling*. В данной работе изучены различные статистические свойства этого поворотного движения, в частности исследованы функции распределения ориентации полимерной молекулы, времени поворота, растяжения полимера. Рассматривается три физически разных ситуации:

- Полимер, помещенный в стационарный сдвиговый поток. Матрица градиентов поля скорости такого потока $\sigma_{ij}^0 = \partial_j v_i$ имеет единственную не

нулевую компоненту $\sigma_{xy}^0 = s$.

- Полимер в случайном потоке поля скорости с ненулевой средней сдвиговой компонентой. Матрица градиентов поля скорости имеет вид $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^0 + \tilde{\sigma}_{ij}(t)$, где $\tilde{\sigma}_{ij}(t)$ - градиент случайной компоненты поля скорости. При этом рассматривается произвольная статистика случайной компоненты поля скорости и единственным предположением является ее относительная малость по-сравнению со средней сдвиговой компонентой.
- Полимер в сдвиговом потоке со случайной компонентой, обладающей гауссовой, изотропной дельта-коррелированной статистикой.

Следует отметить, что вторая и третья ситуации мотивированы одной и той же задачей (исследование поведения полимера в хаотическом потоке, возникающем в эластической турбулентности), однако анализ второй ситуации является в большей степени качественным, хотя и справедливым для произвольной статистики поля скорости, в то время как модельные предположения, сделанные для третьей ситуации позволяют получить количественные предсказания, подтверждающие и проверяющие результаты, полученные для произвольного потока.

Для изучения статистики направлений полимерной молекулы имеет смысл ввести два угла, параметризующие ее ориентацию по отношению к сдвиговой компоненте поля скорости. Здесь и в дальнейшем мы будем предполагать, что сдвиговое поле скорости наблюдается в плоскости xy , причем единственная ненулевая компонента матрицы градиентов равна $\sigma_{xy}^0 = s$. Введем два угла θ, ϕ следующим образом:

$$R_x = R \cos \theta \cos \phi, \quad (1.5)$$

$$R_y = R \cos \theta \sin \phi, \quad (1.6)$$

$$R_z = R \sin \theta \quad (1.7)$$

где R_i - вектор соединяющий два конца полимера, введенный в уравнении (1.1), а R - его абсолютное значение, то есть текущий размер полимера. Геометрический смысл углов θ, ϕ понятен из рисунка 1.1. Угол ϕ показывает ориентацию полимера в плоскости сдвигового потока, в то время как угол θ связан с отклонением молекулы от этой плоскости.

1.3. Полимер в стационарном поле скорости

Рассмотрим сначала ситуацию со стационарным течением, когда случайная компонента поля скорости отсутствует. В этом случае вся стохастичность движения полимера связана с Ланжевенскими шумами в уравнении (1.1). Полимер находится в статистически стационарном состоянии, которое характеризуется вероятностной функцией распределения вектора \mathbf{R} :

$$P_{st}(\mathbf{r}) = \langle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}) \rangle \quad (1.8)$$

Здесь усреднение происходит по тепловым шумам $\xi_i(t)$. Физически выражение $P(\mathbf{r})dr_xdr_ydr_z$ представляет собой вероятность обнаружить молекулу в состоянии, где каждая компонента вектора \mathbf{R} удовлетворяет условию $r_i < R_i < r_i + dr_i$. Функция распределения $P_{st}(\mathbf{r})$ удовлетворяет стационарному уравнению Фоккера-Планка:

$$\left[-\frac{f(r)}{\tau} \frac{\partial}{\partial r_i} r_i + s \frac{\partial}{\partial r_x} r_y - \frac{R_T^2}{6\tau} \Delta_r \right] P_{st}(\mathbf{r}) = 0, \quad (1.9)$$

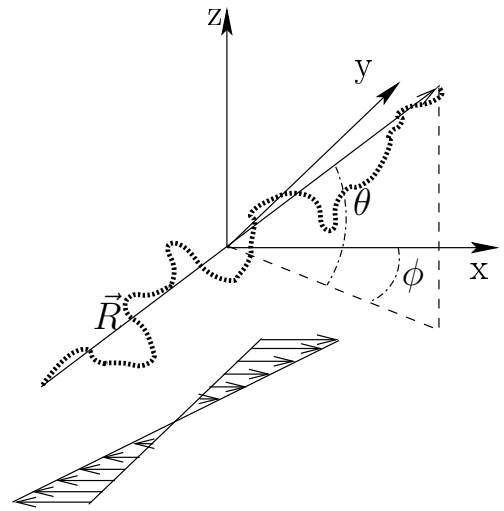


Рис. 1.1. Схема, иллюстрирующая ориентацию полимера относительно сдвиговой компоненты потока жидкости.

где Δ_r - это Лапласиан, построенный из производных по компонентам вектора \mathbf{r} . Это уравнение можно легко решить в случае когда $f(r) = 1$, то есть когда размер полимера много меньше его максимальной длины. Решением уравнения (1.9), удовлетворяющим условию нормировки $\int d\mathbf{r} P_{st}(\mathbf{r}) = 1$ является следующая гауссовская функция:

$$P(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} (\det I)^{-1/2} \exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{r}^T I^{-1} \mathbf{r} \right] \quad (1.10)$$

$$I = \frac{R_T^2}{3} \begin{pmatrix} 1 + \text{Wi}^2/2 & \text{Wi}/2 & 0 \\ \text{Wi}/2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (1.11)$$

где число Вайссенберга определено как $\text{Wi} = s\tau$, а координатные оси в матрице I упорядочены как x, y, z . Из этого вида стационарного распределения напрямую следуют выражения для среднеквадратичных флуктуаций вектора \mathbf{R} :

$$\langle R_x^2 \rangle = \left(1 + \frac{\text{Wi}^2}{2} \right) \frac{R_T^2}{3} \quad (1.12)$$

$$\langle R_y^2 \rangle = \langle R_z^2 \rangle = \frac{R_T^2}{3} \quad (1.13)$$

Видно, что при больших значениях числа Вайссенберга, когда $\text{Wi} \gg 1$ полимер действительно оказывается вытянут вдоль оси x , так как $\langle R_x^2 \rangle \gg \langle R_y^2 \rangle, \langle R_z^2 \rangle$.

Ориентационная функция распределения $P_{ang}(\theta, \phi)$ получается из выражения (1.10) путем интегрирования по модулю вектора \mathbf{r} :

$$P_{ang}(\theta, \phi) = C \frac{\cos \theta}{\left\{ 1 - \frac{\cos^2 \theta}{4 + \text{Wi}^2} [\text{Wi}^2 \cos(2\phi) + 2\text{Wi} \sin(2\phi)] \right\}^{3/2}}, \quad (1.14)$$

где C - нормировочная константа, обеспечивающая выполнение условия

$$\int d\theta d\phi P_{ang}(\theta, \phi) = 1. \quad (1.15)$$

Из выражения (1.14) видно, что функция $P_{ang}(\theta, \phi)$ симметрична по отношению к обращению $\theta \rightarrow -\theta$, но не симметрична по отношению к замене $\phi \rightarrow -\phi$.

Пик функции распределения приходится на точку $\theta = 0, \phi = \phi_0 > 0$. Это связано с тем, что процессы приближения к полуустойчивой точке равновесия с $\theta = 0, \phi = 0$ и последующего проворачивания не являются симметричными. Полимер проводит больше времени приближаясь к точке равновесия. При больших числах Вайссенберга характерные углы отклонения полимера от главной оси потока x малы и могут быть оценены как $\theta, \phi \sim \phi_0 \sim \text{Wi}^{-1} \ll 1$. При этом асимптотическое поведение “хвостов” функции распределения имеет следующий вид: в области $\phi_0 \ll \theta \ll 1$ справедлива аппроксимация $P_{st}(\theta, \phi) \propto \theta^{-2}$, в то время как в области $\phi \gg \theta \sim \phi_0$ функция распределения ведет себя как $P_{ang}(\theta, \phi) \propto \sin^{-2}(\phi)$.

Функция распределения длины полимера $P_{el}(R)$ может быть получена из (1.10) интегрированием по углам θ, ϕ . В общем случае этот интеграл не может быть выражен в специальных функциях. Однако, простые выражения могут быть получены в предельных случаях $\text{Wi} \ll 1$ и $\text{Wi} \gg 1$. При исчезающе малых значениях числа Вайссенберга поток практически не растягивает полимер, поэтому функция распределения по длинам полимера в главном порядке совпадает с равновесной:

$$P_{el}(R) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{R^2}{R_T^3} \exp\left(-\frac{R^2}{2R_T^2}\right). \quad (1.16)$$

В обратном пределе $\text{Wi} \gg 1$, в системе есть сильная анизотропия, так как полимер проводит большую часть времени вытянутым вдоль оси x . Поэтому в главном приближении можно считать $R = R_x$, что приводит к следующему результату:

$$P_{el}(R) = \sqrt{\frac{12}{\pi(2 + \text{Wi}^2)}} \frac{1}{R_T} \exp\left[-\frac{3R^2}{(2 + \text{Wi}^2)R_T^2}\right]. \quad (1.17)$$

1.4. Полимер в случайных потоках

В этой секции мы рассмотрим поведение полимера в случайных потоках, с большой средней сдвиговой компонентой. Подобные потоки возникают при исследовании эффекта эластической турбулентности [39, 40, 68, 69]. Мы будем предполагать, что флуктуации поля скорости оказывают большее влияние на движение полимера, нежели Ланжевенские шумы. Более того, мы будем в основном рассматривать ситуации когда полимер достаточно сильно вытянут, так что его ориентация может быть корректно определена. При достаточно сильно сдвиговой компоненте поля скорости полимер проводит большую часть времени ориентированным в направлении, близком к направлению сдвигового потока. Время от времени флуктуации вблизи этого направления прерываются быстрыми проворотами полимера, после которых его ориентация меняется на противоположную. Мы сконцентрируемся на исследовании статистических свойств этих процессов, в частности получим, как и в предыдущем разделе, выражения для стационарных функций распределения углов ориентации полимера, изучим статистику растяжений полимера. Помимо этого мы получим предсказания на вид функции распределения временных интервалов между последовательными проворотами полимера.

Случайный поток поля скорости характеризуется матрицей градиентов

$$\sigma_{ij}(t) = \partial_j V_i = s\delta_{iX}\delta_{jY} + \tilde{\sigma}_{ij}(t), \quad (1.18)$$

в которой первый член связан со средней сдвиговой компонентой поля скорости, а второй представляет собой случайную компоненту. Статистические свойства случайной компоненты, возникающей в реальных экспериментах по эластической турбулентности практически не известны. Из несжимаемости жидкости следует бесследовость матрицы σ . Из общих соображений можно заключить, что характерное время корреляции потока τ_σ может быть оценено через среднюю Ляпуновскую экспоненту $\bar{\lambda}$, связанную с этим потоком $\tau_\sigma \sim \bar{\lambda}^{-1}$. В даль-

нейшем мы будем предполагать, что сила этого потока мала, так что в типичной ситуации $\tilde{\sigma} \ll s$. Как будет видно, даже при таком небольшом количестве предположений относительно статистики поля скорости можно получить достаточно полное описание статистических свойств движения полимера. Качественные результаты и размерные оценки полученные для произвольной статистики поля скорости будут проверяться на модельной системе, в рамках которой случайная компонента поля скорости имеет изотропную гауссовскую “белозумную” статистику:

$$\langle \tilde{\sigma}_{ij}(t) \tilde{\sigma}_{kl}(t') \rangle = D \delta(t - t') (4\delta_{ik}\delta_{jl} - \delta_{il}\delta_{kj} - \delta_{ij}\delta_{kl}). \quad (1.19)$$

Здесь усреднение проводится по реализациям поля скорости, а тензорная структура в правой части (1.19) связана с предположением об изотропии поля скорости. Коэффициент D характеризует “мощность” случайной компоненты и будет в дальнейшем предполагаться малым по сравнению с градиентом сдвиговой компоненты поля скорости: $D \ll s$.

1.5. Статистика ориентаций полимер

Для изучения статистики ориентаций полимера имеет смысл вывести динамические уравнения на углы θ, ϕ из уравнения (1.1):

$$\partial_t \phi = -s \sin^2 \phi + \xi_\phi, \quad (1.20)$$

$$\partial_t \theta = -s \sin \phi \cos \phi \sin \theta \cos \theta + \xi_\theta, \quad (1.21)$$

$$\partial_t \ln R = -f(R)/\tau + s \cos^2 \theta \cos \phi \sin \phi + \xi_\parallel, \quad (1.22)$$

здесь $\xi_\phi(t), \xi_\theta(t), \xi_\parallel(t)$ - линейные комбинации матрицы градиентов $\tilde{\sigma}$, возникающие при переходе к сферическим координатам R, θ, ϕ . В модели дельта-коррелированной случайной компоненты поля скорости поля $\xi_\theta, \xi_\phi, \xi_\parallel$ являются

независимыми белыми шумами со следующими корреляционными функциями:

$$\langle \xi_\theta(t) \xi_\theta(t') \rangle = 4D\delta(t - t') \quad (1.23)$$

$$\langle \xi_\phi(t) \xi_\phi(t') \rangle = \frac{4D}{\cos^2 \theta} \delta(t - t') \quad (1.24)$$

$$\langle \xi_{\parallel} \rangle = 6D, \quad \langle \xi_{\parallel}(t) \xi_{\parallel}(t') \rangle = 2D\delta(t - t') \quad (1.25)$$

При выводе уравнений (1.20-1.22) мы пренебрегли вкладом от Ланжевеновских сил, вклад от которых предполагается малым по-сравнению с вкладом от флуктуационной компоненты поля скорости. Следует также отметить, что правые части уравнений (1.20,1.21) не зависят от длины полимера R . Поэтому ориентационная динамика полимера может рассматриваться независимо от динамики его длины. Также полезно заметить, что в случае $f(R) = 0$ уравнение (1.22) описывает динамику расхождения двух Лагранжевых частиц, помещенных в исследуемый поток.

Для статистически стационарных случайных потоков статистика ориентаций полимера может быть описана с помощью функции распределения углов $P_{ang}(\theta, \phi)$, периодичной по обоим углам (в обоих случаях период равен π). Поэтому достаточно рассматривать $P_{ang}(\theta, \phi)$ определенной в области $-\pi/2 < \phi, \theta < \pi/2$. В дальнейшем мы будем использовать нормировочное условие $\int d\phi d\theta P_{ang}(\phi, \theta) = 1$, в котором интеграл берется по вышеуказанной области. Следует отметить, что как следует из уравнений (1.20,1.21), и как было в случае полимера в стационарном потоке, функция $P_{ang}(\theta, \phi)$ является симметричной по углу θ , но не симметрична по углу ϕ . Среднее значение угла ϕ , определяемое как $\phi_t = \langle \phi \rangle$ не равно нулю. В наших условиях в случае положительных значений s оно является положительным и может быть оценено путем сравнения детерминистских и стохастических членов в уравнении (1.20) - в области наиболее вероятных углов они в среднем компенсируют друг-друга. Из малости члена, связанного со случайной компонентой следует условие $\phi_t \ll 1$. Аналогичными рассуждениями можно показать, что характерные флуктуации угла ϕ в этой

области также могут быть оценены как ϕ_t . Такими же будут и характерные флуктуации угла θ .

Следует отметить, что аналогичным образом можно получить и оценку на среднюю Ляпуновскую экспоненту, связанную с исследуемым случайным потоком. Действительно, уравнение $\partial_t r_i = r_j \nabla_j v_i$, описывающее динамику разбегания двух близких Лагранжевых частиц в потоке скорости вырождается в уравнения (1.21,1.20,1.22) в пределе $f(R) = 0$. С другой стороны, поскольку динамика углов не зависит от размера полимера R , полученные в предыдущем абзаце результаты можно использовать для оценки средней Ляпуновской экспоненты потока:

$$\bar{\lambda} = \langle \partial_t r \rangle = \langle s \cos^2 \theta \cos \phi \sin \phi + \xi_{\parallel} \rangle. \quad (1.26)$$

В случае общего положения характерное значение ξ_{\parallel} сопоставимо с ξ_{ϕ} , а потому пренебрежимо по сравнению с первым членом в правой части (1.26). С другой стороны, при $\phi \sim \phi_t \ll 1$ первый член может быть оценен как $s\phi_t$. Что приводит нас к оценке $\bar{\lambda} \sim s\phi_t$. Таким образом, мы можем в общем случае сформулировать критерий слабости случайной компоненты поля скорости как $\bar{\lambda} \ll s$.

Рассмотрим теперь область $|\phi|, |\theta| \gg \phi_t$ в которой случайные члены в уравнениях (1.20,1.21), ξ_{ϕ} и ξ_{θ} являются пренебрежимыми. В этой области угловая динамика является чисто детерминистской. Что приводит к следующей зависимости углов θ, ϕ от времени t :

$$\cot \phi = s(t - t_0), \quad \tan \theta = c \cdot \sin \phi, \quad (1.27)$$

где t_0 и c - некоторые константы, определяемые из предыстории детерминистской динамики. Как следует из уравнения (1.27) вектор ориентации полимера $\mathbf{n} = \mathbf{R}/R$ во время динамики меняет свое направление на противоположное. Поэтому, уравнение (1.27) описывает одиночный проворот полимера. Из статистической стационарности поля скорости следует, что момент времени t_0 имеет равномерное распределение. Этой мерой можно воспользоваться для получения

асимптотического выражения стационарной функции распределения углов θ, ϕ :

$$P_{ang}(\phi, \theta) = \frac{U(\tan \theta / \sin \phi)}{\sin^3 \phi \cos^2 \theta}. \quad (1.28)$$

Здесь неизвестная функция U определяется статистикой величины s и не может быть получена в рамках детерминистского анализа. Она является не универсальной и существенно зависит от статистики случайной компоненты поля скорости. Выражение (1.28) совпадает с результатами, полученными в работе [70], в которой исследовалась динамика твердых вытянутых эллипсоидов в стационарном сдвиговом потоке в присутствии тепловых флуктуаций.

Следует отметить, что из уравнения (1.27) следует, что в детерминистском режиме угол ϕ монотонно уменьшается со временем (если исключить скачок из $-\pi/2$ в $\pi/2$ в момент времени $t = 0$). Поэтому стационарная функция распределения углов ориентации полимера соответствует ненулевому потоку вероятности из положительных в отрицательные значения угла ϕ . Это поток связан с выделенным направлением вращения в плоскости $X - Y$ (по часовой стрелке в случае $s > 0$). Формально потоки вероятности проходящие через границы $\phi = -\pi/2$ и $\phi = \pi/2$ равны, что обеспечивает сохранение полной вероятности.

Функция распределения угла ϕ , P_ϕ может быть получена из полной функции распределения $P_{ang}(\theta, \phi)$ интегрированием по углу θ :

$$P_\phi = \int d\theta P_{ang}(\phi, \theta). \quad (1.29)$$

Интегрируя правую часть выражения (1.28) по углу θ получаем, что асимптотическая форма “хвоста” функции распределения, соответствующая области $|\phi| \gg \phi_t$ имеет вид

$$P_\phi \equiv \int d\theta P_{ang}(\phi, \theta) = C \phi_t \sin^{-2} \phi, \quad (1.30)$$

где C - константа порядка единицы. Формально подобная асимптотика, наблюдавшаяся и в случае стационарных течений связана с потоком вероятности,

который возникает из-за постоянно повторяющихся проворотов полимера по часовой стрелке. Нетрудно убедиться, что поток вероятности, определенный как $P_\phi \partial_t \phi$ действительно является постоянным в детерминистской области.

Рассмотрим теперь функцию распределения угла θ , $P_\theta = \int d\phi P_{ang}(\phi, \theta)$. Рассуждения, аналогичные приведенным в предыдущем абзаце, показывают, что из уравнения (1.28) следует простая алгебраическая асимптотика распределения угла θ : $P_\theta \propto |\theta|^{-2}$, справедливая в области $1 \gg \theta \gg \phi$. Следует, однако, быть осторожным, поскольку выражение (1.28) не работает в специальной области углов, в которой $|\phi| < \phi_t$ и $|\theta| \gg \phi_t$. Эту область углов необходимо исследовать отдельно. В ней можно пренебречь членом ξ_θ в уравнении (1.21). Предполагая также, что $|\theta| \ll 1$, получаем уравнение $\partial_t \ln(\theta) = -s\phi$, в котором единственный член в правой части $s\phi$ может рассматриваться как случайный процесс, независимый от угла θ . В этом случае большие отклонения угла θ связаны с процессами, когда угол ϕ в течении долгого (по сравнению с характерным временем корреляции $\bar{\lambda}^{-1}$) времени флуктуировал в области отрицательных значений порядка $-\phi_t$, при этом эти флуктуации не прерывались проворотами полимера. В этом случае отклонение угла θ может быть оценено как $\ln(\theta/\phi_t) \sim Ts\phi_t$, где T - длительность рассматриваемого процесса. С другой стороны вероятность возникновения такого процесса W может быть оценена как $\ln W \sim -\bar{\lambda}T$, так как он является континуальным обобщением стандартного Пуассоновского процесса. Вероятность наблюдения отрицательных значений угла ϕ в течении время T является произведением $\bar{\lambda}T$ вероятностей отдельных, практически независимых процессов, каждый длиной $\sim \bar{\lambda}^{-1}$. Таким образом, асимптотика функции распределения угла θ может быть вычислена по формуле $P_\theta = dW/d\theta$, которая приводит к алгебраической асимптотике $P_\theta \propto |\theta|^{-a}$, с неизвестным в общем случае коэффициентом a . Величина a зависит от статистики поля скорости, и может быть меньше двух в определенных случаях. Следует отметить, что подобные экспоненциальные хвосты естественно возникают в задачах со слу-

чайными экспоненциальными растяжениями и изучались в контексте функции распределения растяжений полимера в работах [45, 46, 71].

Проиллюстрируем теперь все эти рассуждения на примере модели дельта-коррелированного случайного потока. Если случайная компонента поля скорости мала, по сравнению со средней сдвиговой, то есть $D \ll s$, полимер проводит большую часть времени в области $\theta, \phi \ll 1$. Поэтому, в корреляционной функции (1.24) можно положить $\cos \theta = 1$. В этом случае динамика угла ϕ является полностью независимой, и стационарная функция распределения этого угла P_ϕ удовлетворяет следующему уравнению Фоккера-Планка:

$$[s\partial_\phi \sin^2 \phi + 2D\partial_\phi^2] P_\phi = 0 \quad (1.31)$$

Это уравнение можно переписать в виде

$$\partial_\phi U^{-1}(\phi) \partial_\phi U(\phi) P_\phi = 0, \quad (1.32)$$

где функция $U(\phi)$ определена как

$$U(\phi) = \exp \left[\frac{s}{4D} \phi - \frac{s}{8D} \sin 2\phi \right]. \quad (1.33)$$

Простой вид уравнения (1.32) позволяет получить явный вид стационарного распределения. Единственным решением, удовлетворяющим условию нормировки $\int_0^\pi P_\phi d\phi = 1$ является следующее:

$$P_\phi = \frac{\omega}{D} \int_0^\pi d\varphi \exp \left[-\frac{s}{4D} (\varphi - \sin \varphi \cos(\varphi - 2\phi)) \right], \quad (1.34)$$

где ω - это средняя частота вращений полимера, которая определяется из условия нормировки и равна

$$\omega = \frac{D \exp\left(\frac{\pi s}{8D}\right)}{\pi^2 I_{ix}(x) I_{-ix}(x)}. \quad (1.35)$$

Здесь $x = s/8D$. В случае больших значений $s/D \gg q$ функция распределения локализована в области углов $\phi_t \sim (D/s)^{1/3} \ll 1$. В этом случае все выражения

сильно упрощаются:

$$\omega = \frac{(Ds^2)^{1/3}}{4 \cdot 3^{1/6} \Gamma(7/6) \sqrt{\pi}} \quad (1.36)$$

$$P_\phi = \frac{\omega}{D} \int_0^\infty d\varphi \exp \left[-\frac{s}{8D} \varphi (\varphi - 2\phi)^2 - \frac{s\varphi^3}{24D} \right]. \quad (1.37)$$

Нетрудно убедиться в том, что функция P_ϕ является асимметричной, причем $P_{-\phi} < P_\phi$, то есть полимер действительно проводит большую часть времени в области положительных ϕ . Помимо этого, в области $\phi \gg (D/s)^{1/3}$ функция распределения имеет асимптотику $P_\phi \propto \sin^{-2} \phi$. Можно также найти явное выражение для ϕ_t :

$$\phi_t = \langle \phi \rangle = \left(\frac{D}{s} \right)^{1/3} \frac{\sqrt{\pi} 3^{1/3}}{\Gamma(1/6)}. \quad (1.38)$$

Явный вид асимптотики P_ϕ в области $\phi_t \ll \phi \ll 1$ имеет вид

$$P_{st}(\phi) \sim \frac{1}{16 \cdot 3^{1/6} \Gamma(7/6) \sqrt{\pi}} \left(\frac{s}{D} \right)^{2/3} \frac{1}{\phi^2}. \quad (1.39)$$

Рассмотрим теперь стохастический вклад в функцию распределения $P_{ang}(\phi, \theta)$, соответствующий области $\phi \sim \phi_t$, $\phi_t \ll \theta \ll 1$. В этом случае можно воспользоваться формальным решением уравнения (1.21):

$$\theta(t) = \int_0^\infty d\tau \exp \left(-\frac{s}{2} \int_{t-\tau}^t \sin 2\phi(t') dt' \right) \xi_\theta(t - \tau) \quad (1.40)$$

Как мы уже выяснили случайный процесс $\phi(t)$ является статистически стационарным и не зависит от случайного процесса $\xi_\theta(t)$. Это позволяет нам переписать выражение (1.40) в следующем виде:

$$\theta = \int_0^\infty d\tau \exp(-\varrho(\tau)) \xi_\theta(\tau), \quad (1.41)$$

$$\varrho(\tau) = \frac{s}{2} \int_0^\tau \sin 2\phi(t) dt. \quad (1.42)$$

Для того, чтобы найти функцию распределения $P_{ang}(\phi, \theta)$ в интересующей нас области, проведем усреднение по процессу ξ_θ , оставляя ϱ независимым параметром:

$$P(\theta|\varrho) = (2\pi A)^{-1/2} \exp\left[-\frac{\theta^2}{2A}\right] \quad (1.43)$$

$$A = 4D \int_0^\infty d\tau \exp[-2\varrho(\tau)]. \quad (1.44)$$

Поскольку среднее значение $\langle \dot{\varrho} \rangle \sim (Ds^2)^{1/3}$ положительно, динамика угла θ является релаксационной, поэтому угол θ обычно флуктуирует в области малых углов порядка ϕ_t . Хвосты функции распределения $P_{ang}(\phi \sim \phi_t, \theta)$ определяются большими отрицательными флуктуациями величины $\varrho(t)$. Предполагая, что процесс $\varrho(t)$ достигает своего локального отрицательного минимума в момент времени τ^* такой, что $\varrho(\tau^*) = -\varrho^*$ и $\rho^* \gg 1$, можно оценить характерное значение A с экспоненциальной точностью: $A \sim (D/s)^{1/3} \exp(2\varrho^*)$.

Характерное корреляционное время процесса $\varrho(t)$ оценивается как $\tau_c = (Ds^2)^{-1/3}$, поэтому при больших $\tau^* \gg \tau_c$ можно воспользоваться результатами теории больших отклонений [72], которая предсказывает следующее автомодельное поведение асимптотик функции распределения ρ^* :

$$P(\varrho^*|\tau^*) = \exp\left[-\frac{\tau^*}{\tau_c} S\left(\frac{\varrho^* \tau_c}{\tau^*}\right)\right], \quad (1.45)$$

где $S(x)$ - это так называемая функция Крамера, которая является одной из наиболее важных характеристик случайного поля скорости. Эта функция является вообще говоря не универсальной, и сильно зависит от статистических свойств поля скорости. Даже в рамках упрощенной модели, рассматриваемой здесь невозможно получить аналитическое выражение для этой функции. Ее численное исследование было проделано в работе [73].

Для того, чтобы найти наиболее вероятный момент времени τ^* , необходимо найти максимум вероятности из выражения (1.45) относительно τ^* . Это приво-

дит нас к выражению $\tau^* = \tau_c \varrho^* / x^*$, где x является решением уравнения

$$S(x^*) = x^* S'(x^*). \quad (1.46)$$

Функция Крамера, определенная в (1.45) является выпуклой и меняющейся на величины порядка единицы на масштабах $x \sim 1$. Поэтому, мы можем заключить, что $x^* \sim 1$. Таким образом асимптотика функции распределения ϱ задается выражением

$$P(\varrho^*) \sim \exp(-\varrho^* S'(x^*)). \quad (1.47)$$

Усреднение выражения (1.43) по ϱ^* приводит нас к следующему асимптотическому выражению на интересующую нас функцию распределения:

$$P_{ang}(\phi \sim \phi_t, \theta) \propto |\theta|^{-S'(x^*)}, \quad \phi_t \ll |\theta| \ll 1. \quad (1.48)$$

Видно, что асимптотика действительно является степенной, и показатель степени является не универсальным, зависящим от статистики поля скорости через соответствующую функцию Крамера. Для дельта-коррелированного поля скорости эта асимптотика анализировалась численно в работе [73], результаты исследования показали, что показатель степени с хорошей степенью точности равен $S'(x^*) \approx 3.0$. Таким образом, в этой модели данный вклад является маргинальным, по сравнению с вкладом от детерминистской области, в которой функция распределения угла θ ведет себя как $P_\theta \sim \theta^{-2}$. Однако, возможно ситуация будет иной для других потоков, возникающих в эксперименте.

1.6. Функция распределения времен проворотов

Как следует из выражения (1.27), детерминистский процесс, в котором и определяется момент проворота полимера (угол ϕ меняется сильно только во время детерминистской части эволюции) занимает меньшую долю времени, нежели процесс стохастических флуктуаций вблизи основного направления, задаваемого сдвиговым потоком, то есть в области $|\phi|, |\theta| \sim \phi_t$. Поэтому удобно

определить время проворота (*tumbling time*) T как время между последовательными пересечениями углом ϕ значений $\pm\pi/2$, находящихся в середине детерминистского региона. Поскольку основной вклад во время T связан с процессами стохастических флуктуаций в узкой (шириной порядка ϕ_t) окрестности $\phi = 0$, позиция максимума функции распределения времени T , а также ее характерная ширина могут быть оценены, как характерное время корреляции $(s\phi_t)^{-1}$, являющееся единственным релевантным масштабом времени, связанным со стохастическими флуктуациями.

Область больших времен проворота $T \gg \bar{\lambda}^{-1}$ определяется процессами, в которых полимер не проворачивался в течении долгого времени. Это соответствует большому $\sim \bar{\lambda}T$ числу неудачных “попыток” поля скорости вывести полимер из стохастической области $\phi \sim \phi_t$. Вероятность подобной ситуации может быть оценена как произведение вероятностей каждой такой попытки. Это приводит нас к следующей экспоненциальной асимптотике функции распределения: $\ln P_T \sim -\bar{\lambda}T$, для $T \gg \bar{\lambda}^{-1}$.

Левый “хвост” этой функции, соответствующий $T \ll \bar{\lambda}^{-1}$ не универсален, поскольку является чувствительным к деталям статистики случайного поля скорости. Действительно, он связан с вполне специальными реализациями поля скорости, которые позволяют полимеру аномально быстро пройти через стохастическую область. Физически подобными конфигурациями являются вихри, закрученные по часовой стрелке в плоскости $X - Y$. В таких вихрях значение ξ_ϕ аномально велико, много больше своего характерного значения $s\phi_t^2$. В этом случае можно считать, что во время подобной флуктуации поля скорости член ξ_ϕ в правой части уравнения (1.20) не зависит от времени. Это приближение справедливо, так как мы рассматриваем времена проворачивания T много меньшие $\bar{\lambda}^{-1}$ - характерного времени корреляции скорости. Подобные предположения позволяют точно решить уравнение (1.20): $T = \pi/\sqrt{|\xi_\phi|s}$. В этом выражении мы воспользовались тем фактом, что основной вклад в T связан с

прохождением области малых значений ϕ : $|\phi| \ll 1$. Это справедливо в случае $s \gg |\xi_\phi| \gg s\phi_t^2$. Если $1/s \ll T \ll \bar{\lambda}^{-1}$, выражение для функции распределения времени T принимает вид

$$P_T = \frac{2\pi^2}{T^3 s} P_\xi \left(-\frac{\pi^2}{T^2 s} \right), \quad (1.49)$$

где P_ξ - это одновременная функция распределения величины ξ_ϕ , зависящая от деталей статистики поля скорости.

Для того, чтобы найти функцию распределения времен поворота в случае дельта-коррелированного поля скорости введем не стационарную функцию распределения $\mathcal{P}(t, \phi)$, которая будет представлять собой вероятность найти полимер не провернувшийся через время t , после того, как он начал свою динамику с начального состояния $\phi = \pi/2 - 0$. Функция $\mathcal{P}(t, \phi)$ описывается нестационарным уравнением Фоккера-Планка:

$$(\partial_t - s\partial_\phi \sin^2 \phi - 2D\partial_\phi^2) \mathcal{P}(t, \phi) = 0 \quad (1.50)$$

с начальным условием $\mathcal{P}(t = 0, \phi) = \delta(\phi - \pi/2 + 0)$ и граничными условиями, соответствующими отсутствию потока вероятности при $\phi = \pi/2$. Следует отметить, что при подобном граничном условии очевидно, что стационарное распределение P_ϕ , найденное в предыдущей секции не будет решением уравнения (1.50), так как оно соответствует постоянному потоку вероятности. Функция распределения времен поворота определяется как

$$P_T = \frac{\partial}{\partial T} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} d\phi \mathcal{P}(T, \phi). \quad (1.51)$$

Используя замену $\mathcal{P}(t, \phi) = U^{1/2}(\phi)\Psi(t, \phi)$, где U взята из уравнения (1.33) можно свести задачу к уравнению квантово-механического типа на функцию Ψ :

$$\partial_t \Psi = -\hat{H}\Psi \quad (1.52)$$

$$\hat{H} = -2D\partial_\phi^2 + \frac{s^2}{8D} \sin^4 \phi - s \sin \phi \cos \phi. \quad (1.53)$$

В случае $s \gg D$ граничные условия на функцию Ψ принимают обычный квантово-механический вид. Поэтому можно воспользоваться Эрмитовостью оператора \hat{H} и представить общее решение уравнения (1.52) в виде

$$\Psi(t, \phi) = \sum_n \Psi_n(\phi) \exp(-E_n t), \quad (1.54)$$

где Ψ_n - это собственные функции оператора \hat{H} :

$$\hat{H}\Psi_n(\phi) = E_n\Psi_n(\phi). \quad (1.55)$$

На больших временах асимптотика $\mathcal{P}(t, \phi)$, а значит и P_T будет определяться основным состоянием Ψ_0 :

$$P_T \propto \exp(-E_0 T). \quad (1.56)$$

Для того, чтобы найти явный вид спектра оператора \hat{H} воспользуемся тем, что при $s/D \gg 1$ полимер проводит большую часть времени в области $\phi \sim \phi_t \sim (D/s)^{1/3} \ll 1$. В этом случае можно воспользоваться разложением тригонометрических функций в выражении для \hat{H} (1.53):

$$\hat{H} = (Ds^2)^{1/3} \left[-2\partial_x^2 + \frac{x^4}{8} - x \right], \quad (1.57)$$

где $x = (D/s)^{-1/3}\phi \sim \phi/\phi_t$. Поскольку оператор в квадратных скобках (1.57) является безразмерным, значение энергии его основного состояния будет константой порядка единицы. Это приводит нас к выражению $E_0 \sim (Ds^2)^{1/3} \sim \bar{\lambda}$. Подобным образом можно также прийти к выводу о том, что тело функции распределения P_T также сконцентрировано в области $T \sim \bar{\lambda}^{-1}$.

Рассмотрим теперь асимптотику P_T , соответствующую малым значениям T , для которых $\bar{\lambda}T \ll 1$. Эта асимптотика определяется редкими реализациями поля скорости, которые переворачивают полимер аномально быстро. Функция распределения P_T может быть представлена в виде следующего функционального интеграла:

$$P_T \propto \int \mathcal{D}\phi \exp \left[-\frac{1}{8D} \int dt (\dot{\phi} + s \sin^2 \phi)^2 \right]. \quad (1.58)$$

Здесь интегрирование проводится по траекториям, удовлетворяющим граничным условиям $\phi(0) = \pi/2, \phi(T) = -\pi/2$. В случае $T \ll (Ds^2)^{-1/3}$ основной вклад в функциональный интеграл (1.58) дают оптимальные траектории, минимизирующие эффективное действие. При этом с экспоненциальной точностью $P_T \sim \exp(-A)$, где $A = -\frac{1}{8D} \int dt (\dot{\phi} + s \sin^2 \phi)^2$ - величина действия, вычисленная на оптимальных траекториях $\phi(t)$. Явный вид этих траекторий может быть найден варьированием действия:

$$\ddot{\phi} = s^2 \sin^3 \phi \cos \phi. \quad (1.59)$$

Это уравнение классической механики, которое может быть легко проинтегрировано стандартными методами. Интегрирование приводит нас к следующим соотношениям между временем проворота T и константой интегрирования E , аналогичной энергии частицы в классической механике:

$$T = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{d\phi}{\sqrt{2E + s^2 \sin^4 \phi}} = \left[\frac{8}{E(2E + s^2)} \right]^{1/4} K \left(\frac{1}{2} - \sqrt{\frac{E}{4E + 2s^2}} \right), \quad (1.60)$$

где $K(x)$ - эллиптический интеграл второго рода. При этом само действие A имеет следующую форму:

$$A = \frac{ET}{4D} + \frac{s^2}{4D} \int d\phi \frac{\sin^4 \phi}{\sqrt{2E + s^2 \sin^4 \phi}} = \frac{ET}{4D} + \frac{3\pi s^2}{32D\sqrt{2E}} {}_3F_2 \left(\frac{1}{2}, \frac{5}{4}, \frac{7}{4}; \frac{3}{2}, 2; -\frac{s^2}{2E} \right). \quad (1.61)$$

Здесь мы выкинули постоянный член вида $2s \int \dot{\phi} \sin^2 \phi dt = \pi s / (8D)$, поскольку он сокращается нормировочным множителем. Выражение (1.61) представляет собой очень сложную, неявно заданную функцию $A(T)$. Рассмотрим ее асимптотики. В случае $sT \ll 1$, то есть аномально малых времен проворота, можно воспользоваться соотношениями $s \ll \sqrt{2E}$ и $E = \pi^2 / (2T^2)$. В этом случае получается следующее простое выражение:

$$A = \frac{\pi^2}{8DT} \quad (1.62)$$

В другом предельном случае $s^{-1} \ll T \ll (Ds^2)^{-1/3}$ константа E задается выражением $E = 8K^4(1/2)/(s^2T^4)$ и действие имеет вид

$$A = \frac{2K^4(1/2)}{3Ds^2T^3}. \quad (1.63)$$

Промежуточная асимптотика (1.63) является функцией произведения Ds^2T^3 , так как она определяется в основном движением в области $\phi \sim \phi_t \sim (D/s)^{1/3}$. В этой области динамика полимера определяется как случайной так и стационарной компонентой поля скорости. Асимптотика, соответствующая самым малым временам не зависит от силы сдвигового потока s , так как времена $T \gg s^{-1}$ могут возникать только в результате аномальных флуктуаций случайной компоненты поля скорости.

1.7. Растяжение полимера

Уравнение (1.22), описывающее динамику длины полимера R сильно упрощается в области $\phi \sim \phi_t$, соответствующей стохастической динамике полимера вблизи вблизи оси, задаваемой сдвиговым потоком. В этой области можно воспользоваться разложениями тригонометрических функций, заменив $\sin \phi$ на ϕ , а $\cos \theta$ на единицу. Член ξ_{\parallel} по амплитуде сопоставим с ξ_{ϕ} , который в свою очередь пренебрежим по сравнению с членом $s\phi$. Таким образом, в стохастической области уравнение, описывающее динамику R сводится к

$$\partial_t \ln R = -\gamma(R) + s\phi, \quad (1.64)$$

где $\gamma(R) = f(R)/\tau$. Следует отметить, что это уравнение не применимо в моменты проворота полимера, когда длина проходит через минимальное значение, так как в этом случае углы ϕ, θ не могут считаться малыми. Уравнение (1.64) справедливо в области $R \gg R_T$, в которой можно пренебречь Ланжевеновскими силами.

Статистика длины R определяется взаимодействием двух членов в правой части уравнения (1.64). Поскольку среднее значение $s\phi$ по порядку величины равно Ляпуновской экспоненте $\bar{\lambda}$, безразмерным параметром, контролирующим статистику растяжений полимерной молекулы является число Вайссенберга $Wi = \bar{\lambda}\tau$, растущее вместе с силой потока. В случае $Wi = 1$, когда два члена в правой части (1.64) в среднем компенсируют друг-друга, система испытывает coil-stretch переход, рассматривавшийся в работах [42, 43, 45, 46, 71] в контексте статистически изотропных случайных потоков. Как будет показано дальше, в случае потоков со средней сдвиговой компонентой ситуация особенно интересна. Качественные изменения функции распределения длины полимера R происходят и при $Wi > 1$. Ниже мы рассмотрим случаи, соответствующие различным значениям числа Вайссенберга, и проанализируем качественный вид функции $P(R)$ в каждом из этих случаев. Качественные анализы будут подтверждены результатами прямых численных симуляций, представленных на рисунке 1.2.

1.7.1. Режим $Wi < 1, \alpha > 0$.

Режим, соответствующий малым числам Вайссенберга $Wi < 1$, является, пожалуй, самым тривиальным, так как в нем в типичной ситуации полимер является слабо растянутым. Большую часть времени молекула проводит в свернутом состоянии с характерным размером R_T , определяемым балансом Ланжевеновских и релаксационных членов в уравнении (1.1). Тем не менее, редкие флуктуации поля скорости приводят к эпизодическим удлинениям полимера до длины R , много большей равновесной: $R \gg R_T$. Подобные процессы интенсивно изучались в работах [45, 46, 71], где было показано, что соответствующая асимптотика функции распределения длины полимера имеет степенной вид:

$$P(R) \propto R^{-1-\alpha}, \quad (1.65)$$

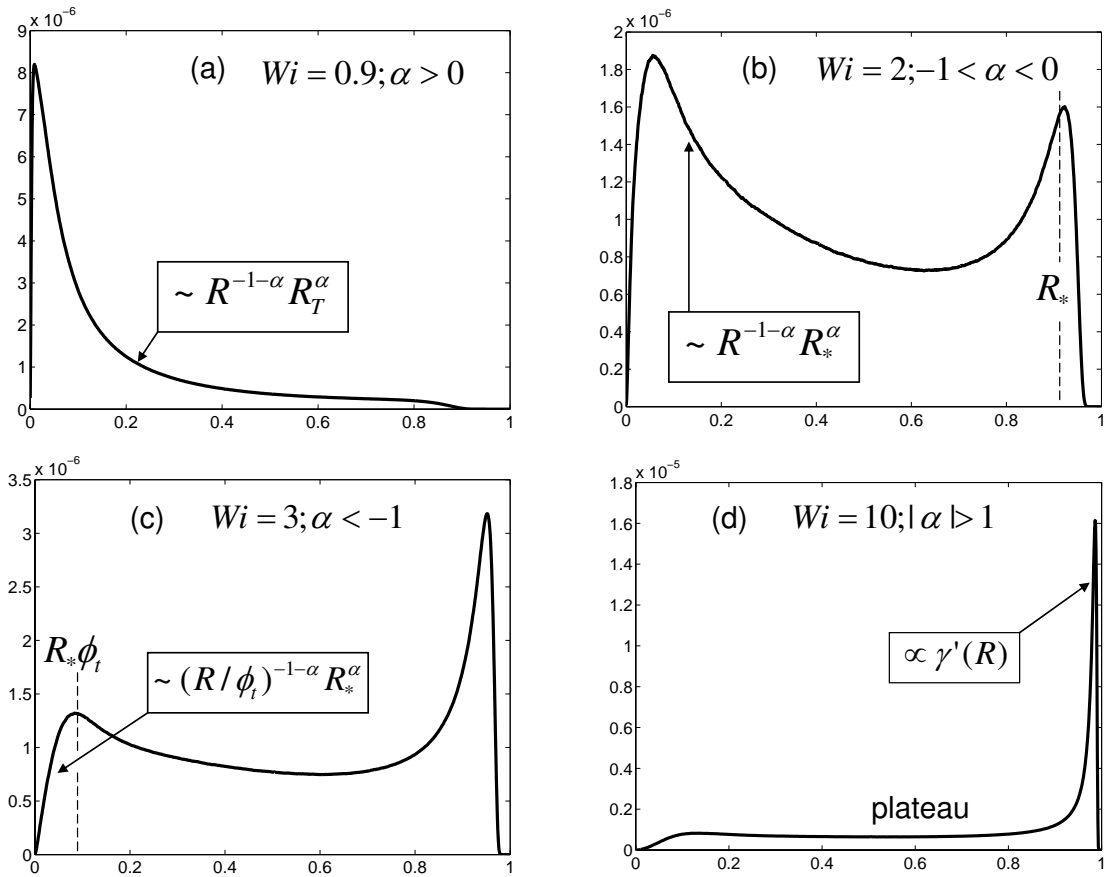


Рис. 1.2. Функция распределения длины полимера R , представленной в единицах максимальной длины R_m . Симуляции проводились в модели дельта-коррелированной случайной компоненты поля скорости, описанной в тексте.

причем $\alpha > 0$. Уравнение (1.65) справедливо при $R_m \gg R \gg R_T$, в области где коэффициент релаксации $\gamma(R)$ слабо отличается от $\gamma(0) = 1/\tau$. На графике 1.2а хорошо видна эта степенная асимптотика. Положительное значение коэффициента α гарантирует сходимость интеграла $\int dR P(R)$ в области $R \gg R_T$. Поэтому нормировочный множитель из выражения (1.65), определяемый данным интегралом, может быть оценен как $R_T^{-\alpha}$. Показатель степени убывает с увеличением числа Вайссенберга, и пересекает нулевое значение в точке *coil-stretch* перехода, при $Wi = 1$.

Степенная асимптотика (1.65) определяется долгими (по-сравнению с временем корреляции $\bar{\lambda}^{-1}$) процессами растяжения полимера из равновесной длины R_T к текущему состоянию с $R \gg R_T$. При этом, во время этого долгого растяжения правая часть уравнения (1.64) не всегда остается положительной поскольку угол ϕ флуктуирует и член $s\phi$ больше чем γ только в среднем. Более того, этот процесс состоит из чередующихся стадий стохастической и детерминистской динамики (связанной с проворотами полимера). Несмотря на то, что во время первой половины проворота полимера его размер существенно уменьшается, длина полимера восстанавливается практически до первоначального значения во время второй половины этого процесса. Поэтому процессы проворота не влияют существенно на полное растяжение полимера, которое определяется в основном стохастической фазой динамики. Как и в случае статистики времен проворота и функции распределения угла ϕ , вероятность больших растяжений полимера можно оценить используя приближение Пуассоновского процесса. Пусть W - вероятность наблюдения полимера с длиной R . Эта вероятность связана с долгим процессом растяжения длительностью T , при этом W есть произведение практически вероятностей практически независимых отдельных процессов, с характерной длительностью $\bar{\lambda}^{-1}$. Поэтому справедливо приближение $\ln W \sim -\bar{\lambda}T$. С другой стороны, как следует из уравнения (1.64), $\ln(R/R_T) \sim \bar{\lambda}T$. Используя эти две оценки мы получаем степенную асимпто-

ку (1.65) функции распределения длин полимера $P = dW/dR$.

1.7.2. Режим $Wi > 1$, $-1 < \alpha < 0$.

Выше точки *coil-stretch* перехода, когда $\bar{\lambda}\tau > 1$, полимер проводит большую часть времени в сильно растянутом состоянии, его типичная длина R_* много больше равновесной R_T . Усредняя правую часть уравнения (1.64) получаем соотношение $\gamma(R_*) = \bar{\lambda}$.

Асимптотика функции распределения, соответствующая области $R_T \ll R \ll R_*$ описывается тем же степенным законом (1.65). Единственным отличием от режима $Wi < 1$ является то, что основной вклад в нормировочный интеграл $\int dR P(R)$ связан с областью $R \sim R_*$. Поэтому, вычисление нормировочной константы приводит к выражению $P \sim R_*^\alpha R^{-1-\alpha}$ для асимптотики, соответствующей $R \ll R_*$. Переход от положительных к отрицательным значениям α связан с существенными изменениями динамических конфигураций, ответственных за форму степенной асимптотики: процесс растяжения, типичный для $\alpha > 0$ сменяется на процесс сжатия полимера, существенный для отрицательных значений α . Степенная асимптотика определяется длительными $T \gg \bar{\lambda}^{-1}$ (включающими много проворотов) процессами сжатия полимера из состояния $s \sim R_*$ в текущее состояние с размером $R \ll R_*$. При этом рассуждения, объясняющие степенную зависимость полностью аналогичны случаю $\alpha > 0$, то есть $Wi \ll 1$.

Форма правого “хвоста”, соответствующая аномально большим растяжениям $R_m - R \ll R - R_*$ также может быть объяснена с помощью общих рассуждений. Область экстремальных растяжения характеризуются очень быстрыми релаксационными процессами, поэтому временной производной в левой части уравнения (1.64) можно пренебречь. В результате возникает соотношение, связывающее текущее значения растяжения R и угла ориентации ϕ : $\gamma(R) = s\phi$. Более того, в этом случае приближение сильной релаксации справедливо и для

уравнения (1.20), поэтому угол ϕ напрямую связан с текущим значением случайного члена ξ_ϕ , что приводит нас к соотношению $s\phi^2 = \xi_\phi$. Другими словами, процессы аномального растяжения полимера связаны с редкими флуктуациями поля скорости, приводящими к прокручиванию полимера против часовой стрелки до состояния с большим положительным значением угла ϕ : $1 \gg \phi \gg \phi_t$. Эти рассуждения позволяют получить выражение для асимптотики функции распределения длин полимера:

$$P(R) = 2s^{-1}\gamma\gamma'P_\xi(\gamma^2/s), \quad (1.66)$$

где P_ξ - это одновременная функция распределения градиентного члена ξ_ϕ . Следует отметить, что выражение (1.66) для асимптотики, связанной с аномально большими значениями длины полимера справедливо для всех режимов и произвольных значений Wi, α .

1.7.3. Режим $Wi > 1, \alpha < -1$.

Как только константа α становится меньше -1 , величина R_* начинает соответствовать максимуму функции распределения $P(R)$. Это изменение формы функции распределения сопровождается возникновением плато (см. график 1.2с), связанного с дополнительным вкладом в функцию распределения, связанным с детерминистской угловой динамикой.

Причина возникновения плато следующая. Для углов ϕ , много меньших единицы, но больших характерного значения ϕ_t , размер полимера R и его направление ϕ удовлетворяют уравнениям $\partial_t \ln R = s\phi$ и $\partial_t \phi = -s\phi^2$, как следует из общих выражений (1.20, 1.64). Интегрируя эти уравнения, получаем выражение $R = A|t - t_0|$, где t_0 и A - константы интегрирования, последняя из которых может быть оценена как $A \sim \bar{\lambda}R_*$. Эксплуатируя статистическую стационарность поля скорости, из которой следует однородное распределение величины t_0 , и пересчитывая меру dt_0 в функцию распределения величины R , мы приходим

к соотношению $P(R) = C/R_*$, в котором C - константа порядка единицы, не зависящая от значения R . Это асимптотика соответствует плато, наблюдаемом на графике 1.2с.

Детерминистский вклад в функцию распределения $P(R)$, оцениваемый как $\sim 1/R_*$ не отменяет вклада, связанного со стохастической областью, и оцениваемого, как $\sim R_*^\alpha R^{-1-\alpha}$, связанного с процессами длительного сжатия полимера с начальной длиной R_* . Оба этих вклада сосуществуют, причем в режиме $-1 < \alpha < 0$ стохастический вклад является доминирующим, как видно из графика на рисунке 1.2b. В случае $\alpha < -1$ ситуация обратна: доминирует вклад от детерминистских процессов проворота.

Плато продолжается от $R \sim R_*$ вниз вплоть до размеров полимера $R \sim R_*\phi_t$, являющихся минимальными размерами, которых достигает полимер в процессе проворота, при условии, что его начальный размер был порядка R_* . Следует, однако, отметить, что если начальный размер полимера был меньше чем R_* , то во время проворота его длина достигает размеров меньших чем $R_*\phi_t$. Поэтому, в области $R < R_*\phi_t$ асимптотика функции распределения определяется процессами проворота, в которых начальный размер полимера R_0 был много меньше R_* . Такое начальное состояние может возникнуть в результате длительных процессов сжатия полимера, находящегося в стохастической области с $\phi \sim \phi_t$. Используя рассуждения полностью аналогичные приведенным в предыдущих абзацах, получаем, что вероятность стартовать с такого начального состояния может быть оценена как $\sim R_*^\alpha R_0^{-1-\alpha}$. С другой стороны, поскольку любое R_0 , из промежутка R и R/ϕ_t трансформируется в результате проворота в текущее значение R , которое обладает аналогичной функцией распределения:

$$P \sim \int_R^{R/\phi_t} \frac{dR_0}{R_0} \times \frac{R_*^\alpha}{R_0^{1+\alpha}} \sim R_*^{-|\alpha|} \left(\frac{R}{\phi_t} \right)^{|\alpha|-1}. \quad (1.67)$$

Это уравнение объясняет резкое затухание функции распределения на графике

1.2с в области малых значений R .

1.7.4. Режим $Wi \gg 1$, $\alpha \ll -1$.

В режиме с аномально большими числами Вайссенберга типичное значение длины полимера R_* приближается к максимально возможному R_m . Условие быстрой релаксации $R\gamma'(R) \gg \gamma$, которое уже использовалось для исследование самой правой асимптотики (1.66), в этом случае применимо и в непосредственной окрестности R_* . Малость величины $\gamma/(R\gamma')$ допускает пренебрежение временной производной в левой части уравнения (1.64), что приводит нас к соотношению $\gamma(R) = s\phi$. Пересчитывая распределения длины полимера R через функцию распределения угла ϕ получаем

$$P(R) \sim s^{-1}\gamma'(R)P_\phi(\gamma/s), \quad (1.68)$$

где мы также использовали предположение $\gamma(R)/s < \phi_t$. В этой особой области параметров изменения функции P_ϕ малы, поэтому в основном зависимость от R в выражении (1.68) определяется фактором $\gamma'(R)$. Уравнение (1.68) применимо и в области $R < R_*$ до тех пор пока параметр $R\gamma'(R)/\gamma$ остается большим. В этой области функция распределения может быть оценена как $P \sim \gamma'(R)/\gamma(R_*)$. При меньших значениях R функция распределения имеет плато $P \sim \gamma(0)/[R_*\gamma(R_*)]$ (это обобщение результатов, полученных ранее на случай $Wi \gg 1$). Эти рассуждения объясняют нетривиальную форму графика функции распределения, представленного на рисунке 1.2d.

Таким образом, мы показали, что функция распределения длин полимера обладает сложной и богатой зависимостью от числа Вайссенберга. Типичное значение длины полимера в зависимости от этого параметра может варьироваться от равновесного значения R_T вплоть до значения R_* , близкого к максимальному R_m . При этом в области сильных растяжений полимера особая форма функции распределения связана с процессами подстраивания размера полимера под

значение, связанное с его текущей ориентацией. На графике функции распределения можно выделить различные области, связанные как со стохастической динамикой полимера, так и с детерминистскими процессами его проворота.

Рассмотрим теперь задачу о растяжении полимера в дельта-коррелированном случайном поле скорости, при этом ограничимся случаем $Wi < 1$ и областью длин полимера $R < R_m$. Формальное решение уравнения (1.1) может быть представлено в виде

$$R_i(t) = \int_0^\infty dt \exp[-(t-t')/\tau] W_{ij}(t, t') \xi_j(t') \quad (1.69)$$

$$\hat{W}(t, t') = T \exp \left[\int_{t'}^t \tilde{\sigma}(t'') dt'' \right] \quad (1.70)$$

Для того, чтобы получить функцию распределения длин полимера, усредним сначала по Ланжевеновским шумам $\xi_i(t)$:

$$P(\mathbf{R}|\sigma) \propto \exp \left[-\frac{1}{2} \mathbf{R}^T \hat{I}^{-1} \mathbf{R} \right] \quad (1.71)$$

$$\hat{I} = \frac{2R_T^2}{3\tau} \int_0^\infty dt' \hat{W}^T(t') \hat{W}(t) \exp(-2t/\tau) \quad (1.72)$$

где $\hat{W}(t) = \hat{W}(t, 0)$, а $P(\mathbf{R}|\sigma)$ - функция распределения растяжений полимера при фиксированной реализации поля скорости. На больших временах $t \gg \tau$ собственные значения матрицы $\hat{W}^T \hat{W}$ становятся сильно разделены, поэтому абсолютное значение вектора \mathbf{R} определяется наибольшим собственным значением I_1 матрицы \hat{I} :

$$P(R|\tilde{\sigma}) \propto \exp \left[-\frac{R^2}{2I_1} \right] \quad (1.73)$$

Как было показано в работе [58] на больших временах собственные значения λ_k матрицы $\hat{W}^T \hat{W}$ удовлетворяют условию $\lambda_1 \gg \lambda_2 \gg \lambda_3$, поэтому динамика наибольшего из них $\lambda_1 = \exp(2\rho)$ описывается уравнением

$$\dot{\rho} = \frac{s}{2} \cos^2 \theta \sin 2\phi + \xi_{\parallel}. \quad (1.74)$$

При этом, главное собственное значение I_1 принимает вид

$$I_1 = \frac{2R_T^2}{3\tau} \int_0^{\infty} dt \exp [2\rho(t) - 2t/\tau] \quad (1.75)$$

Как и в предыдущих рассуждениях $\rho(t)$ - это интеграл стационарного случайного процесса с характерным временем корреляции $\tau_c = (Ds^2)^{-1/3}$, а большие отклонения I_1 связаны с большими флуктуациями $\rho(t)$. Предполагая, что интеграл (1.75) определяется окрестностью перевальной точки $t = t^*$ получаем оценку $I_1 \propto \exp(2\rho^* - 2t^*/\tau)$, где $\rho^* = \rho(t^*)$. Асимптотика функции распределения величины ρ^* при фиксированном t^* имеет следующую форму:

$$P(\rho^*|t^*) \propto \exp \left[-\frac{t^*}{\tau_c} S_\rho \left(\frac{\rho^* \tau_c}{t^*} \right) \right] \quad (1.76)$$

Как и в предыдущих секциях, нетрудно показать, что оптимальное значение t^* имеет вид $t^* = \tau_c \rho^*/x$, где x удовлетворяет уравнению

$$S_\rho(x) - xS'_\rho(x) + (\tau_c/\tau)S'_\rho(x) \quad (1.77)$$

В режиме ниже *coil-stretch* перехода $\tau_c > \tau$. Поэтому функция распределения по длинам полимера будет иметь степенные асимптотики $P(R) \propto R^{-1-\alpha}$. При этом коэффициент α может быть вычислен точно в случае $\tau_c \gg \tau$. Поскольку большие отклонения определяются процессами для которых Ланжевеновские шумы пренебрежимы, можно воспользоваться уравнением (1.74).

Для вычисления α воспользуемся производящей функцией $M_q(t) = \langle R^q(t) \rangle \propto \exp(A_q t)$. Выражение для α получается из уравнения $A_\alpha = 0$. Усреднением по ξ_{\parallel} можно показать, что

$$M_q = \exp [Dq^2 t - \gamma q t] \int d\phi Z_q(\phi, t) \quad (1.78)$$

$$Z_q = \langle \exp[q\rho(t)] \delta(\phi - \phi(t)) \rangle \quad (1.79)$$

При этом производящая функция Z_q удовлетворяет уравнению

$$\partial_t Z_q = \left[2D\partial_\phi^2 + s\partial_\phi \sin^2 \phi + \frac{qs}{2} \sin 2\phi \right] Z_q \quad (1.80)$$

Единственное отличие этого уравнения от уравнения Фоккера-Планка (1.31) в последнем члене. Заменой $Z_q = U(\phi)\Psi(t, \phi)$ можно как и в предыдущих секциях свести задачу к квантовой механике в мнимом времени:

$$\partial_t \Psi = -\hat{H}_q \Psi \quad (1.81)$$

$$\hat{H}_q = -2D\partial_\phi^2 + \frac{s^2}{8D} \sin^4 \phi + (q-1)s \sin \phi \cos \phi \quad (1.82)$$

Это уравнение нельзя решить точно в случае $q \sim 1$, однако можно воспользоваться асимптотическими методами в случае $q \gg 1$, которые как раз соответствуют большим значениям α . В этом случае на больших временах асимптотика Z_q имеет вид $Z_q(t) = \alpha \exp(-\epsilon(q)t)$, где $\epsilon(q)$ - основное состояние оператора в правой части (1.82). При $q \gg 1$ основной вклад в $\epsilon(q)$ определяется классическом минимумом эффективного потенциала в гамильтониане уравнения (1.82). После тривиальной алгебры получаем

$$\epsilon(q) \sim -3 \cdot 2^{-5/3} (q^4 D s^2)^{1/3}, \quad 1 \ll q \ll s/D \quad (1.83)$$

$$\epsilon(q) \sim qs/2, \quad q \gg s/D \quad (1.84)$$

При этом степень α может быть найдена из уравнения $A_\alpha = 0$, где

$$A_q = Dq^2 - q/\tau - \epsilon(q) \quad (1.85)$$

Поэтому показатель степени α оказывается зависящим от параметра $s\tau$:

$$\alpha = \frac{81}{32} \frac{\gamma^3}{Ds^2}, \quad s\tau \gg 1 \quad (1.86)$$

$$\alpha = \frac{\gamma}{D}, \quad s\tau \ll 1 \quad (1.87)$$

Следует отметить что последнее выражение (1.87) не зависит от силы сдвигового потока s и совпадает с выражением для показателя степени в изотропном случайном потоке. Это связано с тем, что при $s\tau \ll 1$ большие флуктуации, приводящие к сильным растяжениям полимера обусловлены исключительно хаотической компонентой поля скорости. Однако, в случае $s\tau \gg 1$ видно, что

сдвиговая компонента сильно меняет показатель степени, значительно уширяя хвосты функции распределения. Этот факт достаточно нетривиален, так как сама по себе сдвиговая компонента не растягивает полимер экспоненциально сильно, а потому не может привести к степенным асимптотикам. Таким образом наблюдаемое уширение - результат совместного действия хаотической и регулярной компонент поля скорости.

Производство энтропии в линейных системах

2.1. Конфигурационная энтропия

В этой главе будет рассмотрена задача нахождения функции распределения производства энтропии в линейных стохастических системах. Мы будем рассматривать линейные неравновесные системы, находящиеся в статистически стационарном состоянии. Несмотря на то, что результаты, представленные в этой главе справедливы для широкого круга систем, основным примером, используемым для их иллюстрации будет полимерная молекула, помещенная в стационарное поле скорости.

Равновесная система, с микроскопической потенциальной энергией $U(\mathbf{R})$ взаимодействующая с термостатом температуры T описывается распределением Гиббса $\mathcal{P}_{eq}(\mathbf{R}) \sim \exp[-U(\mathbf{R})/T]$, позволяющим вычислить вероятность найти систему в микроскопическом состоянии \mathbf{R} . Простейший пример подобного рода - полимерная молекула, состояние которой описывается вектором \mathbf{R} , связывающим ее концы, и потенциальной энергией $U(R)$, зависящей от длины полимера. В тепловом равновесии для любой подобной системы справедлив принцип детального баланса [23, 74–76], который связывает вероятность $\mathcal{P}\{\mathbf{R}\}$ определенной траектории $\{\mathbf{R}\} \equiv \{\mathbf{R}(t'); 0 < t' < t\}$ с вероятностью обратной траектории $\{\mathbf{R}^*\}$:

$$\ln \frac{\mathcal{P}\{\mathbf{R}\}}{\mathcal{P}\{\mathbf{R}^*\}} = \frac{U(\mathbf{R}(t)) - U(\mathbf{R}(0))}{T}. \quad (2.1)$$

Этот принцип не справедлив для произвольных неравновесных систем, например для полимерной молекулы, помещенной во внешний поток поля скорости. Такие системы характеризуются ненулевым средним производством энтропии. В общем случае, можно ввести понятие конфигурационной энтропии, которая

определяется как степень нарушения принципа (2.1):

$$\mathcal{S} = \ln \frac{\mathcal{P}\{\mathbf{R}^*\}}{\mathcal{P}\{\mathbf{R}\}} + \frac{U(\mathbf{R}(t)) - U(\mathbf{R}(0))}{T} \neq 0. \quad (2.2)$$

Физический смысл этой энтропии зависит от рассматриваемой системы, а также от процедуры обращения траектории \mathbf{R}^* . Нас будет интересовать функция распределения величины \mathcal{S} , которая получается усреднением по различным траекториям $\{\mathbf{R}\}$. В статистически стационарных неравновесных системах она зависит только от длины интервала t . Более того, если длина интервала t много больше характерного времени корреляции данной системы τ функция распределения энтропии $P(\mathcal{S}|t)$ имеет следующий асимптотический вид [24, 72]:

$$P(\mathcal{S}|t) \sim \exp[-t\mathcal{L}(\mathcal{S}\tau/t)/\tau], \quad (2.3)$$

где $\mathcal{L}(x)$ - функция больших отклонений (функция Крамера), соответствующая величине \mathcal{S} . В этой главе мы найдем явное выражение для $\mathcal{L}(x)$ для широкого класса систем, описываемых уравнением (1.1) с постоянным коэффициентом релаксации $f(R) = 1$ и произвольной бесследовой стационарной матрицей σ_{ij} .

Вероятность определенной траектории \mathbf{R} в конфигурационном пространстве может быть представлена в следующем виде:

$$\mathcal{P}\{\mathbf{R}\} \sim \exp\left(-\int_0^t dt' \left(\dot{\mathbf{R}} - \hat{\sigma}\mathbf{R} + \mathbf{R}/\tau\right)^2 / (4T)\right). \quad (2.4)$$

Для рассматриваемых нами систем можно предложить по-крайней мере два определения произведенной энтропии используя разные процедуры обращения времени:

$$\mathcal{S}_c = \int_0^t dt' \dot{\mathbf{R}}^T(t')(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^T)\mathbf{R}(t') / (2T) + \mathcal{O}(1), \quad (2.5)$$

$$\mathcal{S}_T = \tau^{-1} \int_0^t dt' \mathbf{R}^T(t')\hat{\sigma}\mathbf{R}(t') / (2T) + \mathcal{O}(1), \quad (2.6)$$

где за $\mathcal{O}(1)$ обозначены члены, не растущие со временем t и введена эффективная температура $T = 2R_T^2/3\tau$. Конфигурационная энтропия \mathcal{S}_c определена с помощью процедуры обращения $\dot{\mathbf{R}} \rightarrow -\dot{\mathbf{R}}$ и не имеет определенного физического смысла для полимерной системы, в тоже время для широкого класса неравновесных систем, взаимодействующих с термостатом и выведенных из равновесия неконсервативными силами она совпадает с обычной термодинамической энтропией и пропорциональна диссипированной в системе энергии. В случае полимерной молекулы термодинамическая энтропия \mathcal{S}_T определена с помощью процедуры $\dot{\mathbf{R}} \rightarrow -\dot{\mathbf{R}}, \hat{\sigma} \rightarrow -\hat{\sigma}$.

2.2. Производство энтропии полимером во внешнем потоке

Вычислим сначала функцию Крамера, соответствующую конфигурационной энтропии \mathcal{S}_c . Для этого введем производящую функцию, определенную как

$$Z_q(t, \mathbf{R}) \equiv \langle \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}(t)) \exp(-q\mathcal{S}_c) \rangle_{\xi}. \quad (2.7)$$

Усреднение по случайным шумам ξ приводит к следующему уравнению на Z_q :

$$\partial_t Z_q = \hat{L}_q Z_q, \quad (2.8)$$

$$\hat{L}_q = -\nabla_i (\sigma_{ij} R_j - R_i/\tau) + T \nabla_i \nabla_i, \quad (2.9)$$

$$\nabla_i = \partial_i + q(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^+)_{ij} R_j / (2T),$$

На больших временах $t \gg \tau$ асимптотическое поведение производящей функции Z_q будет иметь простой экспоненциальный вид: $Z_q \propto \exp(-\lambda_q t)$, где λ_q - минимальное собственное значение спектральной задачи $\hat{L}_q \Psi_q = \lambda_q \Psi_q$. При этом, функция Крамера $\mathcal{L}(x)$ связана с λ_q преобразованием Лежандра. Действительно, при $t \gg \tau$ можно воспользоваться выражением (2.3) для вычисления

асимптотики Z_q . При усреднении по \mathcal{S}_c можно воспользоваться методом перевала:

$$Z_q \sim \exp(-(\mathcal{L}(\omega_q) - \omega_q \mathcal{L}'(\omega_q)) t / \tau), \quad -q = \mathcal{L}'(\omega_q). \quad (2.10)$$

Таким образом, $\mathcal{L}(\omega_q) = \tau \lambda_q - q \omega_q$, где $\omega_q = \tau d\lambda_q/dq$. Для того, чтобы найти спектр λ_q , будем искать асимптотическое решение (2.8) в следующем виде:

$$Z_q(t, \mathbf{R}) = \exp\left(-\lambda_q t - \frac{R_i B_q^{ij} R_j}{2T}\right). \quad (2.11)$$

Зануляя коэффициенты перед членами вида $x^2 \exp(\dots)$ и $\exp(\dots)$ получаем следующую систему уравнений на λ_q, \hat{B}_q :

$$\begin{aligned} \lambda_q &= \text{tr}\left(\hat{B}_q + \hat{\sigma} - \hat{1}/\tau\right), \quad \hat{M} + \hat{M}^+ = 0, \\ \hat{M} &\equiv \left(\hat{B}_q + q(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^+)/2\right)\left(\hat{\sigma} - \hat{1}/\tau + \hat{B}_q - q(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^+)/2\right), \end{aligned} \quad (2.12)$$

Это алгебраическая система уравнений может быть использована для нахождения явного вида зависимости λ_q . Нетрудно убедиться, что при $q = 0$ производящая функция Z_q стационарна: $\lambda_{q=0} = 0$. Это связано с тем, что Z_0 - это стационарная функция распределения величины \mathbf{R} , которая совпадает с Гиббсовским распределением в равновесной ситуации. В частном случае сдвигового потока ее явное выражение представлено в уравнении (1.10).

Рассмотрим теперь произвольный стационарный планарный поток, с следующей матрицей градиентов: $\sigma_{11} = -\sigma_{22} = a$, $\sigma_{12} = b + c$, $\sigma_{21} = b - c$. В этом случае можно явно разрешить систему уравнений (2.12) и получить следующее выражение для λ_q :

$$\lambda_q = \left(\sqrt{1 + 4q(1 - q)c^2\tau^2} - 1\right) \tau^{-1}, \quad (2.13)$$

Видно, что производящая функция определена только в интервале $q \in [q_-; q_+]$, где $q_{\pm} \equiv 1/2 \pm \sqrt{1/4 - 1/(c^2\tau^2)}$. Значения q_{\pm} определяют асимптотики функции

Крамера $\mathcal{L}(x)$:

$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} \frac{\mathcal{L}(x)}{x} = q_{\pm} \quad (2.14)$$

Линейные асимптотики функции Крамера представляют собой маргинальный случай применимости теории больших отклонений. Действительно, как следует из определения (2.3) в случае линейных асимптотик (2.14) вероятность больших значений произведенной энтропии не зависит от длины промежутка. Качественно это может быть объяснено тем, что в вероятность обнаружения подобных флуктуаций основной вклад дают события, когда почти вся энтропия была произведена на достаточно коротком промежутке, длиной меньше чем рассматриваемый интервал t . В таком случае, действительно, вероятность наблюдения больших производств энтропии в главном порядке не зависит от длины интервала. Следует отметить, что линейные асимптотики функции Крамера естественным образом возникают в линейных системах. В частности они наблюдались и подробно рассматривались в работах [33, 77, 78].

Воспользовавшись уравнениями (2.10,2.13) можно получить явное выражение для функции Крамера $\mathcal{L}(x)$:

$$\mathcal{L}(\omega) = \sqrt{(1 + c^2\tau^2)(4c^2\tau^2 + \omega^2)} - 1 - \omega/2. \quad (2.15)$$

Неожиданным свойством функции Крамера (2.15) является ее независимость от симметричной части матрицы $\hat{\sigma}$, несмотря на то, что от нее зависит матрица B_q . Формально это свойство связано с существованием изоспектральных преобразований, не изменяющих спектра \hat{L}_q (или по крайней его основного собственного значения). Нам не известно простого физического объяснения этой симметрии. Следует отметить, что подобная инвариантность отсутствует в случае трехмерных потоков. В частности, для трехмерной матрицы $\hat{\sigma}$: $\sigma_{11} = -a_1, \sigma_{22} = a_1 + a_2, \sigma_{33} = -a_2, \sigma_{13} = c, \sigma_{31} = -c$ выражения для $\mathcal{L}(x)$ получается из (2.15) заменой $\tau \rightarrow \tau/|1 + (a_1 + a_2)\tau|$.

Следует также отметить, что полученная функция Крамера удовлетворяет

флуктуационной теореме $\mathcal{L}(x) - \mathcal{L}(-x) = -x$, которая связывает вероятности производства положительной и отрицательной энтропии. Флуктуационная теорема и ее различные модификации представляют собой редкий пример универсальных соотношений, справедливых для широкого круга систем, находящихся в сильно неравновесном состоянии [20–22].

2.3. Производство термодинамической энтропии

В этом разделе мы приведем альтернативный способ получения явного выражения для функции Крамера, применимый для линейных систем с квадратичным выражением для энтропии (2.5, 2.6). Произвольную траекторию $\{\mathbf{R}\}$, определенную в интервале $[0, t]$ можно разложить в ряд Фурье:

$$\mathbf{R}(t') = \sum_k (\mathbf{c}_k \exp(i\omega_k t') + \mathbf{c}_k^* \exp(-i\omega_k t')) / \sqrt{t}, \quad (2.16)$$

где $\omega_k = 2\pi k/t$, а $k = 1, 2, \dots$. При этом выражение для термодинамической энтропии принимает вид

$$\mathcal{S}_T = \frac{\tau^{-1}}{2T} \sum_k \mathbf{c}_k^+ \hat{\sigma} \mathbf{c}_k \quad (2.17)$$

Используя выражение (2.4) можно получить следующее представление для производящей функции Z_q :

$$Z_q = \int \prod_k \mathcal{D}c_k \mathcal{D}c_k^* \exp \left(- \sum_k c_k^\dagger A_q(\omega_k) c_k / (2T) \right), \quad (2.18)$$

$$\hat{A}_q = \omega^2 + (\hat{\sigma} - \tau^{-1})^T (\hat{\sigma} - \tau^{-1}) + i\omega(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^T) + q(\hat{\sigma} + \hat{\sigma}^T)/\tau, \quad (2.19)$$

В пределе $t \rightarrow \infty$ суммирование по k можно заменить интегрированием по непрерывному спектру частот $\omega > 0$. Это приводит нас к следующему явному выражению для λ_q :

$$\lambda_q = \int_0^\infty \frac{d\omega}{2\pi} \log \left(\frac{\det A_q(\omega)}{\det A_0(\omega)} \right), \quad (2.20)$$

Нетрудно убедиться, что в случае планарных потоков, когда матрицы $\hat{\sigma}$ и $-\hat{\sigma}$ соответствуют физически эквивалентным течениям жидкости имеет место симметрия $\lambda_q = \lambda_{1-q}$, показывающая справедливость флуктуационной теоремы для данной системы. Явное выражение для функции Крамера термодинамической энтропии слишком громоздко, поэтому мы ограничимся только качественным анализом.

Следует отметить, что выражение (2.20) можно использовать и для вычисления функции Крамера конфигурационной энтропии. В этом случае

$$\hat{A}_q = \omega^2 + (\hat{\sigma} - \tau^{-1})^T (\hat{\sigma} - \tau^{-1}) + i\omega(1 - 2q)(\hat{\sigma} - \hat{\sigma}^T). \quad (2.21)$$

Нетрудно убедиться, что из формулы (2.20) получается правильное выражение (2.13) для преобразования Лежандра от функции Крамера конфигурационной энтропии.

Перечислим основные свойства функций Крамера, которые следуют из выражения (2.20):

- Для обеих энтропий функция $\mathcal{L}(x)$ имеет минимум при $x > 0$, что соответствует в среднем положительному производству энтропии. При $x \rightarrow \pm\infty$ функция Крамера имеет линейные асимптотики $\mathcal{L}(x) \sim q_{\pm}x$. При этом q_{\pm} - это минимальное (максимальное) значение q , при котором существует решение уравнения $\det A_q(\omega) = 0$.
- Функция распределения производства конфигурационной энтропии удовлетворяет флуктуационной теореме: $\mathcal{L}(x) - \mathcal{L}(-x) = -x$. В случае термодинамической энтропии эта теорема выполняется только для планарных потоков.
- В планарных внешних потоках функция Крамера конфигурационной энтропии зависит только вихревой компоненты поля скорости.

Пассивный скаляр в приграничной области

Пассивные скалярные поля в жидкости подвержены процессам диффузии (термодиффузии) и адвекции, которые приводят к нетривиальной эволюции их пространственного распределения. В данной главе будут рассмотрены процессы распада пассивного скаляра, будут выведены законы, описывающие его гомогенизацию во внешних хаотических или турбулентных потоках. Мы ограничимся анализом систем с большим числом Шмидта Sc , представляющим собой отношение кинематической вязкости жидкости ν к коэффициенту диффузии скаляра κ . Как было отмечено в работе [59] при больших Sc гомогенизация пассивного скаляра в пограничных областях происходит существенно медленнее, чем в объеме сосуда, поскольку процессы перемешивания сильно подавлены вблизи границ сосуда. Поэтому, поздние стадии распада пассивного скаляра определяются в основном динамикой в пограничной области. Основные стадии эволюции скаляра в этой области были описаны в работе [59] (см. также работу [60]). Развитие этой теории будет представлено ниже. Несмотря на то, что полученные результаты могут быть применены в ряде различных приложений, в этой главе при обсуждении динамики пассивного скаляра основной акцент будет уделяться двум физическим ситуациям. В первой из них перемешивание скаляра происходит в вязком пограничном слое сильно развитой турбулентности (основные свойства этого слоя описаны в книге [79]). Во второй будет рассматриваться хаотический поток, возникающий в "эластической турбулентности" разбавленных полимерных растворов, открытый в работах Гройсмана и Штайнберга [39]. В обоих случаях поле скорости вблизи границы может считаться гладким. В случае эластической турбулентности это предположение подтверждается наблюдаемым спектром скорости, который затухает быстрее чем k^{-3} [39]. Несмотря на

то, что рассматриваемые ситуации относятся к физически разным явлениям, обе они могут быть описаны в рамках одного подхода, что связано с универсальным поведением жидкости вблизи стенки сосуда.

Как было отмечено в работе [59], теория размешивания пассивного скаляра в случайном потоке, развитая для динамики внутри основного объема сосуда, требует существенной модификации, учитывающей свойства пограничной области даже в случае гладких потоков. Это связано в первую очередь с тем, что линейная аппроксимация поля скорости внутри объема перестает работать на границах сосуда. С другой стороны, профиль поля скорости около стенки также имеет вполне определенный вид, что объясняет универсальные свойства затухания пассивного скаляра в пограничной области. Другим свойством, существенно упрощающим анализ, является разделение времен, встречающихся в задаче: характерное время размешивания пассивного скаляра вблизи стенки намного меньше времени корреляции поля скорости. Таким образом для задач перемешивания в пограничной области поле скорости может предполагаться коротко-коррелированным.

Первая задача, которая будет рассмотрена в этой главе относится к размешиванию примесей, для которых границы сосуда являются непроницаемыми. Следует отметить, что эта задача тесно связана теорией быстро-протекающих бимолекулярных химических реакций [60]. Следующая проблема, которая будет рассмотрена в рамках данного подхода связана с исследованием распределения температуры в системе, где температура фиксирована на границах сосуда. В этом случае тепловой поток с границ сосуда в основной объем усиливается флуктуациями поля скорости в пограничной области. А также будет рассмотрена эволюция пассивного скаляра в хаотических течениях через трубки. В этом случае роль времени играет координата вдоль трубки. Подобная задача мотивирована в первую очередь экспериментами Гройсмана и Штайнберга [40, 68].

Одной из отличительных особенностей турбулентного потока является его

сильная перемежаемость, которая указывает на так называемый аномальный скейлинг корреляционных функций поля скорости, которые зависят от интегрального масштаба степенным образом [80]. Теоретически, существование аномального скейлинга такого типа было доказано для пассивного скаляра в поле скорости, описываемом моделью Крайчнана (см. работы [81–83]). Здесь мы покажем, что в задаче о размещивании в пограничной области также наблюдается аномальный скейлинг моментов пассивного скаляра.

3.1. Модельные предположения

Адвекция пассивного скалярного поля θ внешнем полем скорости, сопровождаемая диффузией описывается следующим уравнением:

$$\partial_t \theta + \mathbf{v} \nabla \theta = \kappa \nabla^2 \theta. \quad (3.1)$$

Здесь \mathbf{v} - это скорость потока, а κ - коэффициент диффузии. Ниже будут рассматриваться только несжимаемые жидкости, для которых поле скорости удовлетворяет условию $\nabla \mathbf{v} = 0$. Формально решение задачи Коши для уравнение (3.1) может быть представлено в виде

$$\theta(t_2) = T \exp \left\{ \int_{t_1}^{t_2} dt [-\mathbf{v}(t) \nabla + \kappa \nabla^2] \right\} \theta(t_1), \quad (3.2)$$

где $T \exp$ является обозначением хронологически упорядоченной операторной экспоненты. Необходимо также ввести граничные условия для пассивного скаляра θ . Их явный вид зависит от рассматриваемой физической ситуации. Если θ является полем температуры (или ее отклонением от среднего значения), а материал из которого сделаны стенки обладает достаточной теплопроводностью, то можно считать, что значение θ зафиксировано на стенках. В случае, если значением θ является концентрация примесей в жидкости, а стенки сосуда

непроницаемы, граничным условием будет нулевое значение потока скаляра, направленного перпендикулярно к стенке.

Случайное поле скорости \mathbf{v} полностью определяется своими статистическими свойствами, например корреляционными функциями. Физически в данной задаче корреляционные функции возникают в результате усреднения определенных комбинаций поля скорости по времени, но формально усреднение по времени можно заменить усреднением по ансамблю случайных реализаций поля скорости. Поле скорости является статистически однородным во времени, в то время как пространственная однородность в данной задаче нарушена из-за граничных эффектов. В случае замкнутого сосуда среднее значение скорости равно нулю, (анализ может быть тривиально обобщен на случай ненулевой средней скорости, которая присутствует, например, в экспериментах с трубками). При этих предположениях парная корреляционная функция поля скорости $\langle v_\alpha(t_1, \mathbf{r}_1)v_\beta(t_2, \mathbf{r}_2) \rangle$ зависит от разницы времен $t_1 - t_2$, и от обеих координат \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 .

Как в случае сильно развитой турбулентности, так и в случае потока, возникающего при эластической турбулентности, поле скорости является гладким в приграничной области, которая существенна для данной задачи. Формально это означает, что поле скорости не содержит компонент с масштабами меньше, чем L , где L - это либо ширина вязкого пограничного слоя в случае сильно развитой турбулентности, либо характерный размер сосуда в случае эластической турбулентности. Поле скорости спадает до нуля на границе сосуда. Поэтому размешивание скаляра происходит на временах, существенно больше характерного времени корреляции поля скорости. Эта особенность позволяет использовать для моделирования поля скорости коротко-коррелированную модель, для которой как известно можно вывести замкнутые уравнения на корреляционные функции пассивного скаляра. Ниже мы проиллюстрируем схему получения подобных уравнений.

Рассмотрим эволюцию пассивного скаляра на временном интервале (t_1, t_2) , длина которого $t_2 - t_1$ много больше, чем время корреляции поля скорости τ , но меньше, чем характерное время размешивания скаляра (формально различие этих масштабов, как будет видно дальше, связано с большим значением числа Шмидта). Последнее условие позволяет использовать разложение в ряд Тейлора для упорядоченной Т-экспоненты в уравнении (3.2). Достаточно удержать только два первых члена разложения:

$$\begin{aligned} \theta(t_2) \approx & \theta(t_1) + (t_2 - t_1)\kappa\nabla^2\theta(t_1) - \int_{t_1}^{t_2} dt \mathbf{v}(t)\nabla\theta(t_1) \\ & + \int_{t_1}^{t_2} dt \int_{t_1}^t dt' \mathbf{v}(t)\nabla[\mathbf{v}(t')\nabla\theta(t_1)] . \end{aligned} \quad (3.3)$$

Следующим шагом необходимо провести усреднение по статистике поля скорости на интервале (t_1, t_2) . Реализация поля скорости на этом интервале не зависит от реализации на интервалах $t < t_1$ и $t > t_2$, поскольку $t_2 - t_1 \gg \tau$. Результатом подобного усреднения является следующее соотношение для среднего значения скаляра $\langle\theta\rangle$:

$$\begin{aligned} \langle\theta(t_2, \mathbf{r})\rangle - \langle\theta(t_1, \mathbf{r})\rangle = & (t_2 - t_1)\kappa\nabla^2\langle\theta(t_1, \mathbf{r})\rangle \\ & + (t_2 - t_1)\nabla_\alpha [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r})\nabla_\beta\langle\theta(t_1, \mathbf{r})\rangle] , \end{aligned} \quad (3.4)$$

$$D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \int_0^\infty dt \langle v_\alpha(t, \mathbf{r}_1)v_\beta(0, \mathbf{r}_2)\rangle \quad (3.5)$$

при выводе которого подразумевалось достаточно быстрое затухание парной корреляционной функции поля скорости со временем t . Было также использовано условие несжимаемости $\nabla\mathbf{v} = 0$. Величина $\langle\theta\rangle$ представляет собой значение скаляра, усредненное по флуктуациям скорости. Поскольку значение $t_2 - t_1$ много меньше характерного времени размешивания скаляра, члены в правой части уравнения (3.4) являются малыми поправками к $\langle\theta\rangle$. Поэтому уравнение

(3.4) может быть переписано в дифференциальной форме:

$$\partial_t \langle \theta \rangle = \nabla_\alpha [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \nabla_\beta \langle \theta \rangle] + \kappa \nabla^2 \langle \theta \rangle. \quad (3.6)$$

Тензор $D_{\alpha\beta}$, входящий в уравнение (3.6) может быть назван тензором вихревой диффузии, так как он описывает диффузию пассивного скаляра, связанную с хаотическими перемещениями в случайном потоке (схожими с броуновским движением). Этот эффект аналогичен турбулентной диффузии, возникающей при эволюции пассивного скаляра в инерционном интервале турбулентных потоков. В тоже время тензор $D_{\alpha\beta}$ связан с гладкими потоками, поэтому может быть использован для описания динамики пассивного скаляра на малых масштабах. Координатная зависимость $D_{\alpha\beta}$ связана со статистической неоднородностью случайного потока вблизи границ.

Аналогично, начиная с уравнения (3.2), можно вывести уравнения и на высшие корреляционные функции поля θ . Например, уравнение на парную корреляционную F имеет следующий вид:

$$\partial_t F(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \kappa (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) F \quad (3.7)$$

$$+ \nabla_{1\alpha} [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) \nabla_{1\beta} F] + \nabla_{2\alpha} [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_2) \nabla_{2\beta} F] \\ + \nabla_{1\alpha} [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \nabla_{2\beta} F] + \nabla_{2\alpha} [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \nabla_{1\beta} F],$$

$$F(t, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \langle \theta(t, \mathbf{r}_1) \theta(t, \mathbf{r}_2) \rangle. \quad (3.8)$$

В общем случае, уравнение на корреляционную функцию n -го порядка F_n выглядит следующим образом:

$$\partial_t F_n = \kappa \sum_{m=1}^n \nabla_m^2 F_n + \sum_{m,k=1}^n \nabla_{m\alpha} [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_k) \nabla_{k\beta} F_n], \\ F_n(t, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = \langle \theta(t, \mathbf{r}_1) \dots \theta(t, \mathbf{r}_n) \rangle. \quad (3.9)$$

Структура уравнения (3.9) вполне прозрачна: эволюция корреляционных функций пассивного скаляра определяется как молекулярной диффузией (первый

член в правой части), так и вихревой диффузией, возникающей из-за адвекции (второй член в правой части).

Следует отметить, что в ситуациях, когда молекулярной диффузией можно пренебречь из уравнения (3.9) получаются замкнутые уравнения на моменты пассивного скаляра $\langle \theta^n(\mathbf{r}) \rangle = F_n(\mathbf{r}, \dots, \mathbf{r})$:

$$\partial_t \langle \theta^n(\mathbf{r}) \rangle = \nabla_\alpha [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \nabla_\beta \langle \theta^n(\mathbf{r}) \rangle], \quad (3.10)$$

которые идентичны уравнению (3.6) без молекулярной диффузии. Такой вид уравнения (3.10) получается автоматически из соотношения $\partial_t(\theta^n) = -\mathbf{v}\nabla(\theta^n)$, которое следует из уравнения (3.1), при пренебрежении молекулярной диффузией.

Тензор вихревой диффузии D может быть оценен как $D \sim V^2\tau$, где V - это характерное значение флуктуаций поля скорости, а τ - его время корреляции, которое в свою очередь может быть оценено как $D \sim V^2\tau$. Здесь L , как и раньше, размер вязкого пограничного слоя (Колмогоровская длина) в случае сильно развитой турбулентности или размер сосуда в случае эластической турбулентности. Значение V_L задается характерными флуктуациями поля скорости в объеме сосуда. Для сильно развитой турбулентности V_L - это динамическая скорость пограничного слоя. В этой ситуации медленность затухания пассивного скаляра в пограничной области объясняется малостью значения V/V_L . Именно эта малость позволяет использовать коротко-коррелированную модель для описания поля скорости. В случае эластической турбулентности время корреляции τ определяется характерным временем релаксации полимера, а условие $\tau \sim L/V_L$, является следствием критерия Ламли на сильное растяжение полимера, сформулированное в работе [43] (см. также работы [45, 47, 71])

Корреляционные функции пассивного скаляра представляют собой результат усреднения флуктуаций скаляра по статистике поля скорости. Поэтому для измерения этих корреляционных функций в эксперименте или численном счете

необходимо усреднять по многим повторениям процесса распада (для разных реализаций поля скорости). При этом начальные условия для скаляра должны быть одинаковыми для каждого из повторений. В случае жидкости, проталкиваемой через трубку, статистические функции пассивного скаляра стационарны, и тогда усреднение можно проводить по времени.

В дальнейшем без нарушения общности мы будем предполагать, что значение скаляра внутри сосуда равно нулю.

Рассмотрим процесс распада пассивного скаляра в замкнутом сосуде. Если стенки сосуда достаточно гладкие, а их кривизна по порядку величины равна обратному размеру сосуда, то при изучении поведения скаляра в пограничном слое можно считать стенки плоскими. Введем ортогональную систему координат, связанную со стенкой: координата q соответствует расстоянию до стенки, а координаты r_ζ соответствуют направлениям вдоль нее. В этой системе координат условие несжимаемости принимает следующий вид: $\partial_q v_q + \partial v_1 / \partial r_1 + \partial v_2 / \partial r_2 = 0$. Здесь v_q - это нормальная, а $v_{1,2}$ - продольные компоненты скорости. Поскольку $v_{1,2}$ уменьшаются до нуля при $q \rightarrow 0$, то вблизи стенки можно использовать аппроксимацию $v_{1,2} \propto q$. При этом из условия несжимаемости следует соотношение $v_q \propto q^2$, которое является ключевым свойством поля скорости в пограничной области.

Для плоской стенки естественно предположить однородность корреляционных функций поля скорости при перемещении вдоль стенки. Это позволяет получить следующее общее выражение для компонент вихревого тензора диф-

фузии из (3.5):

$$\begin{aligned}
D_{\zeta\sigma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= H_1(\varrho)\delta_{\zeta\sigma}q_1q_2 + H_2(\varrho)\varrho_\zeta\varrho_\sigma q_1q_2, \\
D_{q\sigma}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= -\frac{1}{2}H_1'(\varrho)\frac{\varrho_\sigma}{\varrho}q_1^2q_2 \\
&\quad -\frac{1}{2}[\varrho H_2'(\varrho) + 3H_2(\varrho)]\varrho_\sigma q_1^2q_2, \\
D_{\zeta q}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \frac{1}{2}H_1'(\varrho)\frac{\varrho_\zeta}{\varrho}q_1q_2^2 \\
&\quad +\frac{1}{2}[\varrho H_2'(\varrho) + 3H_2(\varrho)]\varrho_\zeta q_1q_2^2, \\
D_{qq}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= -\frac{1}{4}\left[\frac{H_1'(\varrho)}{\varrho} + H_1''(\varrho)\right]q_1^2q_2^2 \\
&\quad -\frac{1}{4}[6H_2(\varrho) + 6\varrho H_2'(\varrho) + \varrho^2 H_2''(\varrho)]q_1^2q_2^2,
\end{aligned} \tag{3.11}$$

где $\varrho_\zeta = r_{1\zeta} - r_{2\zeta}$, а H_1 и H_2 - какие-то функции от ϱ . Индексы ζ, σ пробегают значения 1, 2. Такая структура тензора вихревой диффузии связана с определенной q -зависимостью компонент поля скорости, описанной выше. Эта зависимость приводит к соотношениям $D_{q\alpha} \propto q_1^2$, $D_{\zeta\alpha} \propto q_1$ и аналогичным для точки 2. ϱ -зависимость компонент тензора получается из условия несжимаемости $\nabla_{1\alpha}D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0 = \nabla_{2\beta}D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$.

Поскольку в рассматриваемых областях поле скорости является гладким, обе функции H_1 и H_2 имеют регулярное разложение по ϱ (содержащее только четные степени) при $\varrho \ll L$. В этом пределе главный вклад в тензор вихревой диффузии определяется первыми членами разложения:

$$H_1 \approx H_{10} - (\mu + 3H_{20}/2)\varrho^2, \quad H_2 \approx H_{20}, \tag{3.12}$$

$$D_{\zeta\sigma} \approx H_{10}\delta_{\zeta\sigma}q_1q_2, \quad D_{qq} \approx \mu q_1^2q_2^2. \tag{3.13}$$

Величина μ связана с характерной интенсивностью потока вблизи границы. Она может быть оценена как $\mu \sim V_L/L^3$, где, как и раньше V_L - это величина характерных флуктуаций поля скорости внутри сосуда. В рамках теории вязкого пограничного слоя Кармана-Прандтля (детали можно найти в книге [79])

величина пограничного слоя может быть оценена как $L \sim \nu/V_L$ (где ν - кинематическая вязкость жидкости), что приводит к оценке $\mu \sim V_L^4 \nu^{-3}$. Для эластической турбулентности L - это размер сосуда: а $\mu \sim V_L^4 \nu^{-3} \text{Re}^{-3}$, где $\text{Re} = V_L L/\nu$ - это число Рейнольдса.

Размер диффузионного слоя r_{bl} может быть найден путем сравнения вкладов от молекулярной и вихревой диффузии в движение перпендикулярном стенке. Для тензора вихревой диффузии соответствующая компонента может быть оценена как $\mu q^4 \partial_q^2$. Ее сравнение с вкладом от обычной диффузии $\kappa \partial_q^2$ приводит к нижеследующей оценке:

$$r_{bl} = (\kappa/\mu)^{1/4}. \quad (3.14)$$

В дальнейшем мы будем предполагать, что $r_{bl} \ll L$, что эквивалентно условию $\text{Pe} \gg 1$, где Pe - это число Пекле: $\text{Pe} = V_L L/\kappa$. Как следует из (3.14), $L/r_{bl} \sim \text{Pe}^{1/4}$. В случае вязкого пограничного слоя в сильно развитой турбулентности справедлива оценка $\text{Pe} \sim \text{Sc}$, где $\text{Sc} = \nu/\kappa$ - это число Шмидта. Для эластической турбулентности имеет место соотношение $\text{Pe} \sim \text{Sc} \cdot \text{Re}$.

3.2. Статистика среднего значения скаляра

В данном разделе будет рассмотрена простейшая корреляционная функция: среднее значение пассивного скаляра $\langle \theta \rangle$. Эта величина сильно зависит от расстояния до стенки q , и медленно меняется при движении вдоль них. В дальнейшем мы будем игнорировать эту зависимость, предполагая, что характерный масштаб, связанный с ней оценивается как размер сосуда. В этом случае уравнения (3.6,3.13) редуцируются к

$$\partial_t \langle \theta \rangle = \mu \partial_q (q^4 \partial_q \langle \theta \rangle) + \kappa \partial_q^2 \langle \theta \rangle. \quad (3.15)$$

Адвекционный член (пропорциональный μ) в уравнении (3.15) доминирует в области $q \gg r_{bl}$, в то время как диффузионный член является главным при $q \ll$

r_{bl} , где r_{bl} - толщина диффузионного слоя, определенного в (3.14). При анализе данного уравнения мы используем граничное условие $\lim_{q \rightarrow \infty} \langle \theta \rangle = 0$, так как большие q относятся к внутренней части сосуда, внутри которой значение θ уменьшается до нуля.

Нетривиальная эволюция пассивного скаляра начинается в периферийной области после окончания гомогенизации скаляра внутри сосуда. При этом в начале распределение пассивного скаляра имеет характерный масштаб L . Последующая эволюция скаляра может быть разделена на две стадии. В первой стадии толщина слоя δ , внутри которого сконцентрирован скаляр уменьшается по закону $\delta = (\mu t)^{-1/2}$. Когда величина δ достигает значения r_{bl} , начинается следующая стадия, которая характеризуется фиксированным масштабом r_{bl} .

При рассмотрении первой стадии можно пренебречь диффузионным членом (пропорциональным κ) и получить уравнение

$$\partial_t \langle \theta \rangle = \mu \partial_q (q^4 \partial_q \langle \theta \rangle) . \quad (3.16)$$

которое может быть решено с помощью подстановки $\langle \theta \rangle = \exp(-st) \varphi_s(q)$:

$$\varphi_s = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \left(\frac{s}{\mu q^2} \right)^{3/4} J_{3/2} \left(\sqrt{s/\mu} q^{-1} \right) . \quad (3.17)$$

Используя соотношение ортогональности

$$\int_0^\infty dq \varphi_s(q) \varphi_\sigma(q) = \frac{\pi s^{3/2}}{\mu^{1/2}} \delta(s - \sigma) ,$$

можно получить общее решение уравнения (3.16):

$$\langle \theta(t, q) \rangle = \int_0^\infty ds \varphi_s(q) \frac{\sqrt{\mu} e^{-st}}{\pi s^{3/2}} \int_0^\infty dq' \varphi_s(q') \theta_0(q') \quad (3.18)$$

связывающее текущее распределение скаляра с начальным распределением. Это выражение справедливо при $\delta \gg r_{bl}$, когда область $r_{bl} \ll q \lesssim \delta$, в которой можно пренебречь диффузионными членами, является параметрически большой.

Начальное распределение скаляра θ имеет характерную длину L . Поэтому на временах, когда $\delta \ll L$ и $q \ll L$, в уравнении (3.18) можно заменить $\theta(t = 0)$ на $\vartheta_0 = \theta(t = 0, q = 0)$. После вычисления интегралов в уравнении (3.18) получается выражение

$$\begin{aligned} \langle \theta(t, q) \rangle &= \frac{\vartheta_0}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{ds}{s} e^{-st} \varphi_s(q) . \\ &= \vartheta_0 \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\delta}{2q} \right) - \frac{\delta}{\sqrt{\pi} q} \exp \left(-\frac{\delta^2}{4q^2} \right) \right] . \end{aligned} \quad (3.19)$$

Этот профиль имеет универсальную форму и не зависит от деталей начального распределения $\theta(t = 0)$. Стоит отметить, что из выражения (3.19) видно, что сокращения региона, в котором находится скаляр: $\delta = (\mu t)^{-1/2}$. При $q \gg \delta$ справедливо следующее выражение:

$$\langle \theta \rangle \approx \frac{\vartheta_0 \delta^3}{6\sqrt{\pi} q^3} . \quad (3.20)$$

В обратном пределе при $q \ll \delta$ среднее значение скаляра практически постоянно и равно $\langle \theta \rangle = \vartheta_0$.

Следует отметить, что несмотря на то, что уравнение (3.16) имеет дивергентный вид, отвечающий сохранению среднего значения скаляра $\langle \theta \rangle$, полное количество скаляра в периферийной области $\int dq \langle \theta \rangle$ оказывается зависящим от времени после интегрирования выражения (3.19). Это связано с тем, что это решение соответствует ненулевому потоку скаляра, направленному в большие q , то есть внутрь сосуда, который может рассматриваться как гигантский резервуар. Величина потока $\mu q^4 \partial_q \langle \theta \rangle$ может быть получена и напрямую из условия (3.20). Помимо этого, эволюция пассивного скаляра на первой стадии оказывается нечувствительной к граничным условиям. Таким образом, она может быть использована в описании как поведения поля температуры, так и для концентрации примесей.

Во время второй стадии влиянием диффузии уже нельзя пренебрегать и за-

дача становится чувствительной к граничным условиям на скаляр у стенки. Рассмотрим сначала задачу о размещивании примесей, в которой величина скаляра соответствует их концентрации. Граничное условие имеет вид $\partial_q \langle \theta \rangle = 0$ при $q = 0$ и отвечает нулевому потоку скаляра с границ. На больших временах главный вклад в распределение скаляра вносит основное состояние оператора в правой части уравнения (3.15). Поэтому на этой стадии скаляр затухает экспоненциально быстро: $\langle \theta \rangle \propto \exp(-\gamma t)$. Значение γ дается выражением $\gamma = c_E \sqrt{\kappa \mu}$, в котором константа c_E может быть найдена с помощью численных методов: $c_E \approx 1.81$. Асимптотическое поведение самого скаляра $\langle \theta \rangle$ может быть связано с его начальным значением ϑ_0 вблизи стенки: $\langle \theta(q = 0) \rangle = c_0 \vartheta_0 \exp(-\gamma t)$, где $c_0 \approx 1.55$. Аналогично можно вычислить и закон распада полного количества скаляра: $\int dq \langle \theta \rangle = c_1 \vartheta_0 r_{bl} \exp(-\gamma t)$, где $c_1 \approx 1.55$.

В случае когда пассивный скаляр θ является полем температуры, граничные условия фиксируют значение скаляра на границе: $\theta(q = 0) = \vartheta_0$. В этом случае после первой стадии формируется квази-стационарное распределение скаляра $\langle \theta \rangle$, отвечающее постоянному потоку тепла внутрь сосуда. Это распределение может быть найдено напрямую из уравнения (3.15), в котором можно пренебречь членом с производной по времени:

$$\langle \theta \rangle = \frac{2\sqrt{2}}{\pi} \kappa^{3/4} \mu^{1/4} \vartheta_0 \int_q^{\infty} \frac{dq_1}{\mu q_1^4 + \kappa}. \quad (3.21)$$

При $q \gg r_{bl}$ опять получается закон $\langle \theta \rangle \propto q^{-3}$, который соответствует постоянному потоку скаляра внутрь сосуда.

Полученные результаты позволяют обосновать сделанное ранее предположение о разделении времен, приводящее к уравнению (3.9). Для промежуточной фазы эволюции, соответствующей профилю (3.19), характерное время может быть оценено как $t \sim (\mu \delta^2)^{-1}$. Поэтому, отношение времен t/τ (где τ - время корреляции поля скорости) может быть оценено как $t/\tau \sim (L/\delta)^2 \gg 1$.

Во время второй стадии, когда эволюция пассивного скаляра определяется совместным действием диффузии и адвекции, характерный размер δ следует заменить на r_{bl} , что, с учетом вышеприведенных оценок, приводит к результату $t/\tau \sim \text{Pe}^{1/2} \gg 1$.

3.3. Высшие моменты пассивного скаляра

Как было уже отмечено, во время первой стадии эволюции пассивного скаляра можно пренебречь диффузионным членом в уравнении, описывающем эволюцию пассивного скаляра. В этом случае справедливо уравнение (3.10), описывающее динамику высших моментов $\langle \theta^n \rangle$. Высшие моменты, как и среднее значение скаляра зависят в основном от q , их зависимостью от продольной координаты можно пренебречь. Подставляя выражения (3.13) в уравнение (3.10) получаем уравнение

$$\partial_t \langle \theta^n \rangle = \mu \partial_q (q^4 \partial_q \langle \theta^n \rangle), \quad (3.22)$$

которое является обобщением уравнения (3.16). Его решение может быть получено по аналогии с выражением (3.18):

$$\langle \theta^n \rangle = \int_0^\infty ds \varphi_s(q) \frac{\sqrt{\mu} e^{-st}}{\pi s^{3/2}} \int_0^\infty dq' \varphi_s(q') \theta_0^n(q'). \quad (3.23)$$

Здесь мы использовали условие $\delta \gg r_{bl}$, которое позволяет пренебречь влиянием области $q \sim r_{bl}$, где существенна диффузия. Поскольку начальное распределение скаляра θ имеет характерный масштаб L , то при условии $\delta \ll L$, мы получаем, как и раньше, универсальное выражение

$$\langle \theta^n \rangle = \vartheta_0^n \left[\text{erf} \left(\frac{\delta}{2q} \right) - \frac{\delta}{\sqrt{\pi} q} \exp \left(-\frac{\delta^2}{4q^2} \right) \right], \quad (3.24)$$

представляющее собой обобщение уравнения (3.19). Из этого выражения видно, что в области $q \gg \delta$ справедливо асимптотика $\langle \theta^n \rangle \approx \vartheta_0^n \delta^3 / (6\sqrt{\pi} q^3)$.

Строго говоря, выражение (3.23) справедливо не только для моментов скаляра, но и для произвольной усредненной функции, зависящей только от локального значения θ . Это позволяет исследовать функцию распределения скаляра $P(t, q, \theta) = \langle \delta[\theta - \theta(t, q)] \rangle$. Перепишем выражение (3.23) в виде

$$P(t, q) = \frac{1}{q^{3/2}} \int_0^\infty dk \int_0^\infty \frac{dq'}{(q')^{3/2}} k \exp(-\mu k^2 t) \times J_{3/2}(k/q) J_{3/2}(k/q') P(0, q'), \quad (3.25)$$

После взятия интеграла по k получаем

$$P = \frac{1}{\sqrt{\pi\mu t}} \int_0^\infty \frac{dq'}{qq'} \exp\left[-\frac{1}{4q^2\mu t} - \frac{1}{4q'^2\mu t}\right] P(0, q') \times \left\{ \cosh\left[\frac{1}{2qq'\mu t}\right] - 2\mu t qq' \sinh\left[\frac{1}{2qq'\mu t}\right] \right\}. \quad (3.26)$$

Если начальное распределение скаляра представляло собой монотонную функцию $\theta_0(q)$, которая уходила в ноль при $q \rightarrow \infty$ и достигала своего максимального значения при $q \rightarrow 0$, то справедливо соотношение $P(t = 0, q, \theta) = -[1/\theta'_0(q)]\delta[q - q_0(\theta)]$, где функция $q_0(\theta)$ определяется косвенно через уравнение $\theta_0(q_0) = \theta$. Вычисляя интеграл в выражении (3.26) получаем

$$P(t, q, \theta) = \frac{1}{qq_0|\theta'_0(q_0)|} \left[g\left(\frac{1}{q} - \frac{1}{q_0}\right) (1 - 2\mu t qq_0) + g\left(\frac{1}{q} + \frac{1}{q_0}\right) (1 + 2\mu t qq_0) \right], \quad (3.27)$$

$$g(x) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\mu t}} \exp\left(-\frac{x^2}{4\mu t}\right).$$

С ростом t пограничный слой, определяемый δ , уменьшается в размерах. Поэтому падают и характерные значения интересных q . Поскольку q_0 фиксировано для заданного значения θ , то можно использовать разложение по $1/q_0$ для получения универсального выражения для функции распределения:

$$P = \frac{1}{12q^2\sqrt{\pi}(\mu t)^{5/2}q_0^3|\theta'_0(q_0)|} \exp\left(-\frac{1}{4q^2\mu t}\right). \quad (3.28)$$

К сожалению, выражение (3.28) не может быть использовано для вычисления моментов θ , поскольку интегралы $\int d\theta \theta^n P(\theta)$ расходятся вблизи максимального значения скаляра θ_0 . Это связано с тем, что область применимости выражения (3.28) определяется условием $q_0(\theta) \gg q$, которое нарушается при малых q_0 , соответствующих θ близкому к ϑ_0 .

Во время второй стадии диффузия становится существенной, что не позволяет получить замкнутые уравнения на моменты скаляра $\langle \theta^n(t, q) \rangle$. Для того, чтобы найти их необходимо решать полные уравнения (3.9), описывающие эволюцию корреляционных функций пассивного скаляра. Эта задача практически не поддается аналитическому исследованию. Из линейной структуры уравнений (3.9) следует, что асимптотическое поведение корреляционных функций на больших временах определяется основным состоянием оператора, стоящего в правой части уравнения (3.9). При этом, в области $q \gg r_{bl}$, где можно пренебречь диффузионными членами, справедливы замкнутые уравнения (3.22). Член с временной производной оказывается мал при $q \gg r_{bl}$, что позволяет получить следующее универсальное выражение для асимптотического поведения моментов скаляра при $q \gg r_{bl}$:

$$\langle \theta^n(t, q) \rangle \propto q^{-3}, \quad (3.29)$$

Ситуация здесь полностью аналогична среднему значению скаляра, поскольку уравнение (3.22) имеет форму закона сохранения для высших моментов скаляра. Законы $\langle \theta^n(t, q) \rangle \propto q^{-3}$ соответствуют ненулевому потоку высших моментов скаляра на бесконечность.

Рассмотрим теперь случай скаляра - температуры. Поскольку внутри сосуда значение температуры отличается от фиксированного значения на стенке, статистически квазистационарное состояние, формирующееся во время второй стадии характеризуется ненулевым средним потоком. Это состояние может быть найдено путем решения уравнений (3.9), в которых можно пренебречь произ-

водной по времени. В частности, при $q \gg r_{bl}$ ситуация оказывается полностью аналогичной рассмотренной в предыдущем абзаце, и асимптотика высших моментов скаляра также описывается уравнением (3.29). Внутри диффузионного слоя справедлива оценка $\theta \sim \vartheta_0$, где ϑ_0 - это температура на границе сосуда (при этом подразумевается, что внутри сосуда температура равна нулю). Используя уравнение (3.10) получаем оценку $\langle \theta^n \rangle \sim \vartheta_0^n (r_{bl}/q)^3$.

Таким образом, мы показали, что при $q \gg \delta$ во время первой стадии или при $q \gg r_{bl}$ во время второй справедлив закон (3.29). Более того, во время первой стадии верно соотношение $\langle \theta^n \rangle \sim \langle \theta \rangle^n (q/\delta)^{3(n-1)}$, а во время второй неравенство $\langle \theta^n \rangle \gtrsim \langle \theta \rangle^n (q/r_{bl})^{3(n-1)}$. Эти выражения показывают, что высшие моменты пассивного скаляра параметрически больше своих гауссовских оценок, что соответствует сильной перемежаемости в системе. Выражение (3.29) можно рассматривать как проявление аномального скейлинга. Этот скейлинг является экстремальным, поскольку экспоненты, характеризующие зависимость моментов скаляра от q не зависят от номера момента n .

3.4. Парная корреляционная функция

В данном разделе будет рассмотрена парная корреляционная функция $F(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$. Наиболее просто анализируется случай, когда $q_1, q_2 \gg \delta$ в первой стадии или $q_1, q_2 \gg r_{bl}$ во второй. При этом в уравнении (3.7) достаточно оставить только один член $\nabla_{1\alpha} [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_1) \nabla_{1\beta} F]$. Это позволяет легко установить асимптотическое поведение $F \propto q_1^{-3}$. Таким образом в этой области поведение парной корреляционной функции полностью аналогично поведению высших моментов.

В случае когда точки \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 близки к друг-другу так что $\varrho \ll L$, при $\varrho_\zeta = r_{1\zeta} - r_{2\zeta}$ задача также может быть исследована аналитически. Используя приближения (3.13) и $|q_1 - q_2| \ll Q$, а также замены переменных $Q = (q_1 + q_2)/2$

и $q = q_1 - q_2$, уравнение (3.7) можно преобразовать к виду

$$\begin{aligned}
\partial_t F &= \mu \partial_Q (Q^4 \partial_Q F) + (\kappa/2) \partial_Q^2 F + 2\kappa \partial_q^2 F \\
&+ \left\{ 4\mu Q^3 q \partial_Q \partial_q - 2\mu Q^3 \varrho \partial_Q \partial_\varrho + [H_{10} q^2 / \varrho - 2(2\mu + 3H_{20}) Q^2 \varrho] \partial_\varrho \right\} F \\
&+ \left\{ 4\mu Q^2 q^2 \partial_q^2 - 2H_{30} Q^4 \varrho^2 \partial_\varrho^2 - 2\mu Q^2 \varrho q \partial_q \partial_\varrho \right. \\
&\left. s + (2\mu + H_{20}) Q^2 \varrho^2 \partial_\varrho^2 + H_{10} q^2 \partial_\varrho^2 \right\} F.
\end{aligned} \tag{3.30}$$

Детали вывода приведены в приложении А. Естественно ввести параметризацию $F = \langle \theta^2(Q) \rangle (1 + \varsigma)$ в которой единица в скобке отвечает основному вкладу в корреляционную функцию, связанному со вторым моментом скаляра, а ς - это малая поправка которая уменьшается до нуля при $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2$.

В области $Q \gg \delta$ во время первой стадии и $Q \gg r_{bl}$ во время второй членом с временной производной в уравнении (3.30) можно пренебречь по сравнению с членом, соответствующим вихревой диффузии. Также можно пренебречь и обычной диффузией. Это приводит к следующему уравнению:

$$\begin{aligned}
&\left\{ (2H_{30} \varrho^2 - 7x^2) \partial_x^2 - 11x \partial_x + 3 + [(2 + H_{20}) \varrho^2 + H_{10} x^2] \partial_\varrho^2 + \right. \\
&\left. (2(1 - 3H_{20}) \varrho + H_{10} x^2 / \varrho) \partial_\varrho \right\} \varsigma = 0,
\end{aligned} \tag{3.31}$$

где $x = q/Q$. При выводе этого уравнения мы воспользовались тем, что $\langle \theta^2(Q) \rangle \propto Q^{-3}$. Решение уравнения (3.31) может быть выражено в виде суммы отдельных вкладов вида $\varsigma_b = (qQ)^b f_b(x, \varrho)$, где f_b удовлетворяют уравнению (3.31) (поскольку qQ - это нулевая мода оператора, входящего в это уравнение). Ясно, что основной вклад в асимптотику определяется членом с $b = 0$ (поскольку отрицательные b не возможны). Так как оператор в уравнении (3.31) имеет вполне определенные скейлинговые свойства, то решения этого уравнения могут быть записаны в простой автомодельной форме $\varsigma = (q/Q)^a \Psi(Q\varrho/q)$. При этом основной вклад в ς определяется наименьшим возможным значением a и является неуниверсальным, зависящим от конкретных коэффициентов H_{ij} . Молекулярная диффузия сглаживает функцию ς на масштабах $q \sim r_{bl}^2/Q$.

Вышеприведенные выражения указывают на следующее естественное поведение парной корреляционной функции: основная аномальная зависимость этой функции связана с поведением второго момента пассивного скаляра. Зависимость от расстояния между двумя точками \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 определяется функцией ς , которая характеризуется нетривиально автомодельной зависимостью от комбинации Q_ϱ/q .

3.5. Затухание скаляра в трубе

Здесь будет рассмотрено поведение пассивного скаляра, проталкиваемого через трубку статистически однородным потоком, у которого хаотическая компонента возбуждена на фоне средней скорости u вдоль трубы. Подобная схема использовалась в экспериментах Гройсмана и Штайнберга [40, 68]. В этой работе хаотический поток (эластическая турбулентность) возбуждался в слабом растворе полимеров, проталкиваемом через криволинейную трубу. В такой системе эволюция скаляра описывается уравнением

$$\partial_t \theta + u \partial_z \theta + v_\alpha \nabla_\alpha \theta = \kappa \nabla^2 \theta, \quad (3.32)$$

где \mathbf{v} - это флуктуирующая часть поля скорости (с нулевым средним значением), а z - это координата вдоль трубы. Дальнейшие вычисления мы будем проводить в предположении, что средняя скорость u намного больше, чем \mathbf{v} , что соответствует экспериментальной ситуации.

Если разница давлений с помощью которой проталкивается поток постоянна, то поток можно считать статистически стационарным и однородным вдоль трубки (сечение которой также полагается постоянным). В этом случае u не зависит от z , а корреляционные функции зависят от разницы времен и разницы координат вдоль трубы. Поэтому, в задаче со стационарной накачкой скаляра в трубу, координата z аналогична времени в распадной задаче. Используя мето-

ды описанные в предыдущих разделах мы приходим к следующим уравнениям на корреляционные функции скаляра:

$$u\partial_z F_n = \kappa \sum_{m=1}^n \nabla_m^2 F_n + \sum_{m,k=1}^n \nabla_{m\alpha} [D_{\alpha\beta}(\mathbf{r}_m, \mathbf{r}_k) \nabla_{k\beta}] F_n. \quad (3.33)$$

Единственное отличие по сравнению с уравнением (3.9) в том, что роль временной производной играет член, отвечающий за адвекцию скаляра вдоль трубы.

Как и раньше мы вводим координату q измеряющую расстояние до заданной точки от стены. Средняя скорость u является функцией q , которая идет к нулю как $u \propto q$ вблизи границы трубы. Это является причиной главного отличия данной задачи, от тех, что рассматривались в предыдущих разделах. Уравнение на среднее значение скаляра принимает вид

$$s_0 q \partial_z \langle \theta \rangle = [\mu \partial_q q^4 \partial_q + \kappa \partial_q^2] \langle \theta \rangle. \quad (3.34)$$

Несмотря на дополнительный фактор q в левой части этого уравнения, качественно картина полностью аналогична той, что получалась в результате исследования уравнения (3.15). Во время первой стадии практически весь скаляр расположен внутри слоя толщины $\delta = s_0/(\mu z)$ и молекулярной диффузией можно пренебречь. Во время этой стадии скаляр затухает по степенному закону с координатой z . Когда δ достигает размеров пограничного слоя r_{bl} , молекулярная диффузия становится существенной и затухание скаляра становится экспоненциально быстрым.

Как и раньше возможно получить полное статистическое описание поведения скаляра во время первой стадии, когда можно пренебречь молекулярной диффузией. В этом случае средние значения любой одноточечной функции скаляра $\Phi(\theta)$, в частности, моменты $\langle \theta^n \rangle$ или функция распределения $P(\theta, q, z) = \langle \delta[\theta - \theta(q, z)] \rangle$ описываются одним и тем же уравнением

$$\partial_z \langle \Phi \rangle = \frac{\mu}{s_0 q} \partial_q q^4 \partial_q \langle \Phi \rangle \equiv \hat{H} \langle \Phi \rangle. \quad (3.35)$$

Это линейное уравнение, которое может быть решено с помощью формализма функций Грина. Решение уравнения (3.35) может быть представлено в виде

$$\langle \Phi(z, q) \rangle = \int_0^{\infty} dq' G(z, q, q') \Phi(z = 0, q'), \quad (3.36)$$

где G - это функция Грина, явное выражение для которой может быть получено после анализа соответствующих задач на собственные функции. Поскольку оператор \hat{H} не Эрмитов, необходимо найти как правые, так и левые собственные функции, которые являются решениями уравнений $\hat{H} f_{\lambda} + \lambda f_{\lambda} = 0$ и $\hat{H}^+ g_{\lambda} + \lambda g_{\lambda} = 0$ соответственно. При чем $H^+ = (s_0/\mu) \partial_q q^4 \partial_q q^{-1}$. Решения этих уравнений могут быть выражены через функции Бесселя:

$$f_{\lambda} = x^3 J_3(x), \quad g_{\lambda} = x J_3(x), \quad x = 2\sqrt{\lambda/q} \quad (3.37)$$

Используя соотношения ортогональности

$$\int_0^{\infty} dq g_{\lambda}(q) f_{\lambda'}(q) = 16\lambda^2 \delta(\lambda - \lambda'),$$

получаем

$$\begin{aligned} G(z, q, q') &= \int_0^{\infty} \frac{d\lambda}{16\lambda^2} \exp(-\lambda\delta^{-1}) f_{\lambda}(q) g_{\lambda}(q') \\ &= \frac{\delta}{q^{3/2}(q')^{1/2}} \exp(-\delta/q - \delta/q') I_3\left(2\delta/\sqrt{qq'}\right). \end{aligned} \quad (3.38)$$

Если начальный профиль скаляра является фиксированным $\theta = \theta_0(q)$, то начальным условием для момента n -го порядка является функция $\theta_0^n(q)$. Для $\delta \ll L$ можно использовать аппроксимацию $\langle \theta^n(0, z) \rangle = \vartheta_0^n$, где $\vartheta_0 = \theta_0(0)$. Интегрирование уравнения (3.36) приводит к выражению

$$\langle \theta^n(z, q) \rangle = \frac{\vartheta_0^n \delta^3}{6q^3} \exp(-\delta/q) {}_1F_1(1, 4, \delta/q). \quad (3.39)$$

Как и раньше, в результате получается универсальный профиль. Если $q \gg \delta$, то как ${}_1F_1$, так и экспоненциальный множитель могут быть заменены на единицу, что дает $\langle \theta^n(z, q) \rangle = \vartheta_0^n \delta^3 / (6q^3)$. Для $q \ll \delta$ получаем $\langle \theta^n(z, q) \rangle = \vartheta_0^n$. Для того, чтобы получить выражение для функции распределения скаляра необходимо воспользоваться начальным условием $P(z = 0, q, \theta) = \delta(\theta - \theta_0(q)) = -(1/\theta'_0(q))\delta(q - q_0(\theta))$. Здесь $q_0(\theta)$ определена, как и раньше с помощью уравнения $\theta_0(q_0) = \theta$. Интегрирование этого выражения с функцией Грина приводит к

$$\begin{aligned} P(z, q, \theta) &= \int dq' G(z, q, q') P(0, q, \theta) \\ &= -\frac{1}{q^{3/2} q_0^{1/2} \theta'_0(q_0)} \exp\left(-\frac{\delta}{q} - \frac{\delta}{q_0}\right) I_3\left(2\frac{\delta}{\sqrt{qq_0}}\right). \end{aligned} \quad (3.40)$$

На больших расстояниях, при $q \gg \delta^2/L$ (и при $L \gg \delta$) можно использовать приближение

$$P(z, q, \theta) \approx -\frac{\delta^4}{6q^3 q_0^2 \theta'_0(q_0)} \exp(-\delta/q). \quad (3.41)$$

Опять таки, это выражение не применимо для вычисления моментов пассивного скаляра, в связи с расходимостью вблизи максимального значения $\theta = \vartheta_0$.

Для эксперимента с трубой характерный масштаб, на котором диффузия становится существенной определяется тем же самым выражением (3.14). Когда δ уменьшается до r_{bl} наступает следующий режим, свойства которого зависят от физического смысла скалярного поля. Для поля концентрации во время этого режима затухание моментов пассивного скаляра вдоль трубы является экспоненциально быстрым. При этом для первого момента (среднего значения скаляра) декремент затухания может быть получен из уравнения (3.34) и определяется наименьшим собственным значением оператора в правой части уравнения. Поэтому при достаточно больших значениях z справедлив закон $\langle \theta \rangle \propto \exp(-\alpha z)$, где $\alpha \sim \kappa^{1/4} \mu^{3/4} s_0^{-1}$. Собственная задача, соответствующая уравнению (3.34) может быть решена численно: $\alpha \approx 3.72 \kappa^{1/4} \mu^{3/4} s_0^{-1}$.

В случае если пассивный скаляр является полем температуры, фиксированным на границе, и не зависящим от координаты вдоль трубы, имеется квазистационарное распределение скаляра. При этом среднее значение температуры описывается уравнением (3.34) с отброшенным членом, отвечающим z производной. Таким образом, мы опять приходим к тому же уравнению, что и в случае скаляра в сосуде, решение которого представлено в (3.21). Высшие моменты температуры ведут себя несколько иначе, но качественно их поведение остается таким же, как и для задачи о скаляре в сосуде. В частности справедливы соотношения $\langle \theta^n \rangle \approx \vartheta_0^n$ при $q \ll r_{bl}$, и $\langle \theta^n \rangle \sim \vartheta_0^n (r_{bl}/q)^3$, при $q \gg r_{bl}$.

Качественно картина остается той же и для парной корреляционной функции пассивного скаляра. Ведущее аномальная зависимость этой функции связана с поведением второго момента пассивного скаляра. Парная корреляционная функция практически не отличима от второго момента при $q_1, q_2 \ll r_{bl}$. Что касается зависимости от расстояния между точками \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , то в случае $q_1, q_2 \gg r_{bl}$ она может быть описана с помощью функции ς , определяемой как и раньше соотношением $F = \langle \theta^2(Q) \rangle (1 + \varsigma)$, которая обладает нетривиальной автомодельной зависимостью от $Q\rho/q$.

Вышеприведенные результаты позволяют обосновать исходное предположение о разделении времен, в случае задачи с трубой. Промежуточная стадия эволюции характеризуется профилем (3.39), для которого характерным временным масштабом является величина $t \sim (\mu\delta^2)^{-1}$. Поэтому отношение времен t/τ (где τ - это, как и раньше, время корреляции поля скорости) может быть оценено как $t/\tau \sim (L/\delta)^2 \gg 1$. Во время второй стадии, когда диффузия является существенной, в этой оценке необходимо произвести замену пространственного масштаба δ на r_{bl} , что приводит к условию $t/\tau \sim \text{Pe}^{1/2} \gg 1$.

Заключение

В ходе работы нами были получены следующие наиболее значимые результаты:

1. Предложена простая модель, позволяющая описывать динамику полимерной молекулы в хаотических и стационарных полях скорости со средней сдвиговой компонентой. Представлено качественное описание поведения полимера, в частности явления *tumbling*. Предложены две модели хаотической компоненты внешнего потока, одна из которых соответствует случайному полю общего положения, а другая предполагает изотропную, дельта-коррелированную статистику случайной компоненты потока.
2. Для задачи со стационарным потоком найдена полная функция распределения состояния полимера, описывающая одновременную статистику как его длины, так и ориентации. Исследована зависимость формы функции распределения от числа Вайссенберга, характеризующего относительную мощность внешнего потока.
3. В случае хаотического внешнего потока изучена функция распределения углов ориентации полимера относительно плоскости сдвиговой компоненты. Показано, что функция распределения угла ϕ (отвечающего за ориентацию полимера внутри плоскости сдвиговой компоненты) асимметрична, и сконцентрирована в области углов $\phi \sim \phi_t \ll 1$. Найдена универсальная асимптотика функции распределения P_ϕ , связанная с детерминистской динамикой полимера: $P_\phi \sim \sin^{-2} \phi$. Для модели с дельта-коррелированной компонентой поля скорости получено точное выражение для функции распределения P_ϕ .
4. Рассмотрена функция распределения угла θ , связанного с отклонением

полимера от плоскости сдвигового потока. Показано, что основное тело функции распределения сконцентрировано в области $|\theta| \sim \phi_t$, а асимптотики соответствующие большим отклонениям состоят из двух вкладов: детерминистского $P_\theta \sim \theta^{-2}$ и стохастического $P_\theta \sim \theta^{-a}$, в котором константа a не универсальна и зависит от функции Крамера, связанной со статистикой поля скорости.

5. Изучена функция распределения времен поворота полимера T . Показано, что ее пик находится в области $T \sim (s\phi_t)^{-1}$, где s - амплитуда сдвиговой компоненты поля скорости. Найдены асимптотики функции распределения P_T в случаях $T \gg (s\phi_t)^{-1}$ и $T \ll (s\phi_t)^{-1}$.
6. Исследована зависимость функции распределения длины полимера $P(R)$ от числа Вайссенберга. Показано, что при разных значениях этого параметра может наблюдаться по крайней мере три качественно разных формы $P(R)$. В каждой из этих ситуаций исследованы асимптотические поведения, соответствующие разным областям.
7. Для полимера в стационарном внешнем потоке вычислена функция Крамера, связанная с распределением диссипации энергии и производства конфигурационной энтропии за фиксированный интервал времени. Найдены условия, при которых эти функции распределения удовлетворяют флуктуационной теореме. Вычислены их асимптотики, а также изучена их зависимость от структуры внешнего потока. Результаты обобщены на случай произвольной линейной стохастической системы.
8. Исследована динамика пассивного скаляра (поля концентрации примесей или флуктуаций температуры), перемешиваемого хаотическим или турбулентным потоком и локализованного вблизи границ сосуда. Найдены универсальные законы, описывающие распад (гомогенизацию) в периферий-

ной области. Показано, что распад скаляра протекает в две стадии, первая из которой характеризуется степенным затуханием скаляра, и сужением области его локализации. Во время второй стадии скаляр сконцентрирован в узком диффузионном слое и распадается экспоненциально быстро. Получены аналитические выражения для средних значений моментов пассивного скаляра, его одноточечной функции распределения, одновременного парного коррелятора. Рассмотрены два типа геометрии, соответствующие замкнутому сосуду и течению в трубе.

Основное содержание диссертации изложено в следующих публикациях:

1. *Lebedev V. V., Turitsyn, K. S.* Passive scalar evolution in peripheral regions. // *Phys. Rev. E.* — 2004. — Vol. 69, no. 3. — P. 036301.
2. *Chertkov M., Kolokolov I., Lebedev V., Turitsyn K.* Polymer statistics in a random flow with mean shear. // *J. Fluid Mech.* — 2005. — Vol. 531. — Pp. 251–260.
3. *Celani A., Puliafito A., Turitsyn K.* Polymers in linear shear flow: A numerical study // *Europhysics Lett.* — 2005. — Vol. 70, no. 4. — Pp. 464–470.
4. *Puliafito A., Turitsyn K.* Numerical study of polymer tumbling in linear shear flows // *Physica D.* — 2005. — Vol. 211, no. 1–2. — Pp. 9–22.
5. *Turitsyn K., Chertkov M., Chernyak V., Puliafito A.* Statistics of Entropy Production in Linearized Stochastic System // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 98, no. 18 — P. 180603.
6. *Turitsyn K. S.* Polymer dynamics in chaotic flows with strong shear component // *Принято к печати в ЖЭТФ.* — 2007.

Приложение А

Уравнение на парный коррелятор

Оператор вихревой диффузии \hat{A} определяется последними членами уравнения (3.7) и имеет следующий вид.

$$\hat{A} = D^{ij} \frac{\partial}{\partial X^i} \frac{\partial}{\partial X^j} + \left(\frac{\partial D^{ij}}{\partial X^i} \right) \frac{\partial}{\partial X^j}. \quad (\text{A.1})$$

Здесь X^i - это расширенный набор переменных (координат) $\{q_1, r_{11}, r_{12}, q_2, r_{21}, r_{22}\}$, а матрица D имеет вид

$$D = \begin{pmatrix} P^{(1)} & U \\ V & P^{(2)} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.2})$$

$$P^{(i)} = \begin{pmatrix} \mu q_i^4 & 0 & 0 \\ 0 & H_{10} q_i^2 & 0 \\ 0 & 0 & H_{10} q_i^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.3})$$

$$U = \begin{pmatrix} H_3 q_1^2 q_2^2 & \mu q_1^2 q_2 (r_{11} - r_{21}) & \mu q_1^2 q_2 (r_{12} - r_{22}) \\ \mu q_1 q_2^2 (r_{21} - r_{11}) & H_1 q_1 q_2 + d^{11} & d^{12} \\ \mu q_1 q_2^2 (r_{22} - r_{12}) & d^{21} & H_1 q_1 q_2 + d^{22} \end{pmatrix}, \quad (\text{A.4})$$

$$V = \begin{pmatrix} H_3 q_1^2 q_2^2 & \mu q_1 q_2^2 (r_{22} - r_{12}) & \mu q_1 q_2^2 (r_{21} - r_{11}) \\ \mu q_1^2 q_2 (r_{11} - r_{21}) & H_1 q_1 q_2 + d^{11} & d^{12} \\ \mu q_1^2 q_2 (r_{12} - r_{22}) & d^{21} & H_1 q_1 q_2 + d^{22} \end{pmatrix} \quad (\text{A.5})$$

$$H_1 = H_{10} - (\mu + 3H_{20}/2) ((r_{11} - r_{21})^2 + (r_{12} - r_{22})^2), \quad (\text{A.6})$$

$$H_3 = \mu + H_{30} ((r_{11} - r_{21})^2 + (r_{12} - r_{22})^2), \quad (\text{A.7})$$

$$d^{ij} = H_{20} q_1 q_2 (r_{1i} - r_{2i})(r_{1j} - r_{2j}). \quad (\text{A.8})$$

Перейдем к новым переменным $Y^i = \{Q, q, R_1, R_2, \varrho, \phi\}$, где $Q = (q_1 + q_2)/2$, $q = q_1 - q_2$, $R_i = (r_{1i} + r_{2i})/2$, $\varrho \cos \phi = r_{11} - r_{21}$, $\varrho \sin \phi = r_{12} - r_{22}$. В этом случае для

оператора вихревой диффузии \hat{A} получаем выражение

$$\begin{aligned} \hat{A} &= D^{ij} T_i^k T_j^l \frac{\partial}{\partial Y^k} \frac{\partial}{\partial Y^l} + D^{ij} T_i^k \left(\frac{\partial T_j^l}{\partial Y^k} \right) \frac{\partial}{\partial Y^l} + \left(\frac{\partial D^{ij}}{\partial X^i} \right) T_j^k \frac{\partial}{\partial Y^k} \equiv \\ &\equiv \tilde{D}^{ij} \frac{\partial}{\partial Y^i} \frac{\partial}{\partial Y^j} + f^i \frac{\partial}{\partial Y^i}, \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

где $T_j^i = \partial Y^i / \partial X^j$ – соответствующая матрица Якоби:

$$T = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1/2 & 0 & 0 & 1/2 \\ 0 & \cos \phi & \sin \phi & 0 & -\cos \phi & -\sin \phi \\ 0 & -\sin(\phi)/\varrho & \cos(\phi)/\varrho & 0 & \sin(\phi)/\varrho & -\cos(\phi)/\varrho \end{pmatrix}. \quad (\text{A.10})$$

Путем прямолинейных алгебраических преобразований можно получить выражение для новой матрицы \tilde{D}^{ij} и члена первого порядка f^i . Общий вид выражений достаточно громоздок. Однако, если начальное распределение скаляра зависит только от q , ненулевыми будут только члены содержащие $\partial_Q, \partial_q, \partial_\varrho$. Поэтому можно ограничиться только набором переменных $\{Q, q, \varrho\}$. В пределе $Q \gg q, \zeta \rightarrow 0$ получаем

$$\tilde{D} = \begin{pmatrix} Q^4(\mu + H_{30}\varrho^2/2) & 2\mu Q^3 q & -\mu Q^3 \varrho \\ 2\mu Q^3 q & 4\mu q^2 Q^2 - 2H_{30} Q^4 \varrho^2 & -\mu Q^2 q \varrho \\ -\mu Q^3 \varrho & -\mu Q^2 q \varrho & (2\mu + H_{20}) Q^2 + H_{10} q^2 \end{pmatrix}, \quad (\text{A.11})$$

$$f^Q = 4Q^3(\mu + H_{30}\zeta^2/2), \quad f^q = 0, \quad f^\varrho = \frac{H_{10}q^2}{\varrho} - 4(\mu + 3H_{20}/2)Q^2\varrho. \quad (\text{A.12})$$

Таким образом окончательное выражение для оператора \hat{A} принимает вид

$$\begin{aligned}
\hat{A} = & (\mu + H_{30}\varrho^2/2)\partial_Q Q^4 \partial_Q + 4\mu Q^3 q \partial_Q \partial_q - 2\mu Q^3 \varrho \partial_Q \partial_\varrho + \\
& +(4\mu Q^2 q^2 - 2H_{30} Q^4 \varrho^2) \partial_q^2 - 2\mu Q^2 q \varrho \partial_q \partial_\varrho \\
& + [(2\mu + H_{20}) Q^2 \varrho^2 + H_{10} q^2] \partial_\varrho^2 + \\
& + 4Q^3 (\mu + H_{30} \rho^2/2) \partial_Q + \left[\frac{H_{10} q^2}{\varrho} - 4(\mu + 3H_{20}/2) Q^2 \rho \right] \partial_\varrho. \quad (\text{A.13})
\end{aligned}$$

Из него следует уравнение (3.30).

Литература

- [1] Transcription against an applied force / H. Yin, M. D. Wang, K. Svoboda et al. // *Science*. — 1995. — Vol. 270, no. 5242. — Pp. 1653–1657.
- [2] Evidence for the universal scaling behaviour of a freely relaxing DNA molecule / S. Manneville, P. H. Cluzel, J. Viovy et al. // *Europhys. Lett.* — 1996. — Vol. 36, no. 6. — Pp. 413–418.
- [3] *Perkins T. T., Smith D. E., Chu S.* Single polymer dynamics in an elongational flow // *Science*. — 1997. — Vol. 276, no. 5321. — Pp. 2016–2021.
- [4] *Doyle P., Shaqfeh E., Gast A.* Dynamic simulation of freely draining flexible polymers in steady linear flows // *J. Fluid Mech.* — 1997. — Vol. 334. — Pp. 251–291.
- [5] *Smith D. E., Chu S.* Response of flexible polymers to a sudden elongational flow // *Science*. — 1998. — Vol. 281, no. 5381. — Pp. 1335–1340.
- [6] *Smith D. E., Babcock H. P., Chu S.* Single-polymer dynamics in steady shear flow // *Science*. — 1999. — Vol. 283, no. 5408. — Pp. 1724–1727.
- [7] *Hegner M., Smith S. B., Bustamante C.* Polymerization and mechanical properties of single RecA-DNA filaments // *PNAS*. — 1999. — Vol. 96, no. 18. — Pp. 10109–10114.
- [8] *Li L., Larson R., Sridhar T.* Brownian dynamics simulations of dilute polystyrene solutions // *Journal of Rheology*. — 2000. — Vol. 44, no. 2. — Pp. 291–322.
- [9] *Hur J. S., Shaqfeh E. S. G., Larson R. G.* Brownian dynamics simulations of single DNA molecules in shear flow // *J. Rheol.* — 2000. — Vol. 44, no. 4. — Pp. 713–742.

- [10] *Cui Y., Bustamante C.* Pulling a single chromatin fiber reveals the forces that maintain its higher-order structure // *PNAS*. — 2000. — Vol. 97, no. 1. — Pp. 127–132.
- [11] Single-molecule studies of the effect of template tension on T7 DNA polymerase activity / G. J. L. Wuite, S. B. Smith, M. Young et al. // *Nature*. — 2000. — Vol. 404, no. 6773. — Pp. 103–106.
- [12] Dynamics of dilute and semidilute dna solutions in the start-up of shear flow / J. S. Hur, E. S. G. Shaqfeh, H. P. Babcock et al. // *J. Rheol.* — 2001. — Vol. 45, no. 2. — Pp. 421–450.
- [13] Direct imaging of single-molecules: from dynamics of a single DNA chain to the study of complex DNA-protein interactions / B. Ladoux, J. Quivy, P. S. Doyle et al. // *Science Progress*. — 2001. — Vol. 84, no. 4. — Pp. 267–290.
- [14] *Chu S.* Biology and polymer physics at the single-molecule level // *Philos. Trans. A*. — 2003. — Vol. 361, no. 1805. — Pp. 689–698.
- [15] *Gerashchenko S., Chevillard C., Steinberg V.* Single-polymer dynamics: Coil-stretch transition in a random flow // *Europhys. Lett.* — 2005. — Vol. 71, no. 2. — Pp. 221–227.
- [16] *Gerashchenko S., Steinberg V.* Statistics of tumbling of a single polymer molecule in shear flow // *Phys. Rev. Lett.* — 2006. — Vol. 96, no. 3.
- [17] Dynamics of Polymeric Liquids. Second Edition. Vol. 2: Kinetic Theory / R. B. Bird, C. F. Curtiss, R. C. Armstrong, O. Hassager. — New York: Wiley-Interscience, 1987.
- [18] Characteristic periodic motion of polymers in shear flow / C. M. Schroeder, R. E. Teixeira, E. S. G. Shaqfeh, S. Chu // *Phys. Rev. Lett.* — 2005. — Vol. 95, no. 1. — Pp. 1–4.

- [19] Shear thinning and tumbling dynamics of single polymers in the flow-gradient plane / R. E. Teixeira, H. P. Babcock, E. S. G. Shaqfeh, S. Chu // *Macromolecules*. — 2005. — Vol. 38, no. 2. — Pp. 581–592.
- [20] *Evans D. J., Cohen E. G. D., Morriss G. P.* Probability of second law violations in shearing steady states // *Physical Review Letters Phys Rev Lett*. — 1993. — Vol. 71, no. 15. — Pp. 2401–2404.
- [21] *Gallavotti G., Cohen E. G. D.* Dynamical ensembles in nonequilibrium statistical mechanics // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 74, no. 14. — Pp. 2694–2697.
- [22] *Kurchan J.* Fluctuation theorem for stochastic dynamics // *Journal of Physics A: Mathematical and General J. Phys. Math. Gen.* — 1998. — Vol. 31, no. 16. — Pp. 3719–3729.
- [23] *Crooks G. E.* Entropy production fluctuation theorem and the nonequilibrium work relation for free energy differences // *Phys. Rev. E*. — 1999. — Sep. — Vol. 60, no. 3. — Pp. 2721–2726.
- [24] *Lebowitz J. L., Spohn H.* A Gallavotti-Cohen-type symmetry in the large deviation functional for stochastic dynamics // *Journal of Statistical Physics J. Stat. Phys.* — 1999. — Vol. 95, no. 1-2. — Pp. 333–365.
- [25] *van Zon R., Cohen E. G. D.* Stationary and transient work-fluctuation theorems for a dragged Brownian particle // *Phys. Rev. E*. — 2003. — Apr. — Vol. 67, no. 4. — P. 046102.
- [26] *Garnier N., Ciliberto S.* Nonequilibrium fluctuations in a resistor // *Phys. Rev. E*. — 2005. — Vol. 71, no. 6. — Pp. 1–4.
- [27] Verification of the crooks fluctuation theorem and recovery of RNA folding free energies / D. Collin, F. Ritort, C. Jarzynski et al. // *Nature Nature*. — 2005. — Vol. 437, no. 7056. — Pp. 231–234.

- [28] *Jarzynski C.* Equilibrium free-energy differences from nonequilibrium measurements: A master-equation approach // *Phys. Rev. E.* — 1997. — Vol. 56, no. 5 SUPPL. A. — Pp. 5018–5035.
- [29] *Jarzynski C.* Nonequilibrium equality for free energy differences // *Phys. Rev. Lett.* — 1997. — Vol. 78, no. 14. — Pp. 2690–2693.
- [30] *Hatano T.* Jarzynski equality for the transitions between nonequilibrium steady states // *Phys. Rev. E.* — 1999. — Vol. 60, no. 5 A.
- [31] *Chernyak V., Chertkov M., Jarzynski C.* Dynamical generalization of nonequilibrium work relation // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 71, no. 2.
- [32] *Chernyak V. Y., Chertkov M., Jarzynski C.* Path-integral analysis of fluctuation theorems for general Langevin processes // *J. Stat. Mech.* — 2006. — no. 8.
- [33] *Visco P.* Work fluctuations for a Brownian particle between two thermostats // *J. Stat. Mech.* — 2006. — no. 6.
- [34] *Derrida B., Lebowitz J. L., Speer E. R.* Free energy functional for nonequilibrium systems: An exactly solvable case // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 87, no. 15.
- [35] *Bodineau T., Derrida B.* Distribution of current in nonequilibrium diffusive systems and phase transitions // *Phys. Rev. E.* — 2005. — Vol. 72, no. 6.
- [36] *Oster G., Wang H.* Rotary protein motors // *Trends in Cell Biology Trends Cell Biol.* — 2003. — Vol. 13, no. 3. — Pp. 114–121.
- [37] *Seifert U.* Fluctuation theorem for a single enzyme or molecular motor // *Europhys. Lett.* — 2005. — Vol. 70, no. 1. — Pp. 36–41.

- [38] *Seifert U.* Fluctuation theorem for birth-death or chemical master equations with time-dependent rates // *Journal of Physics A: Mathematical and General J. Phys. Math. Gen.* — 2004. — Vol. 37, no. 42.
- [39] *Groisman A., Steinberg V.* Elastic turbulence in a polymer solution flow // *Nature.* — 2000. — Vol. 405. — P. 53.
- [40] *Groisman A., Steinberg V.* Efficient mixing of liquids at low Reynolds numbers using polymer additives // *Nature.* — 2001. — Vol. 410. — Pp. 905–908.
- [41] Some observations on the flow of linear polymer solutions through straight tubes at large Reynolds numbers. — Amsterdam, 1949. North-Holland.
- [42] *Lumley J.* Drag reduction by additives // *Ann. Rev. Fluid Mech.* — 1969. — Vol. 1. — P. 367.
- [43] *Lumley J.* Drag reduction in turbulent flow by polymer additives // *J. Polymer Sci.: Macromolecular Reviews.* — 1973. — Vol. 263, no. 7. — Pp. 263 – 290.
- [44] *de Gennes P.* Coil-stretch-transition of dilute flexible polymers under ultra-high velocity gradients // *J. Chem. Phys.* — 1974. — Vol. 60. — P. 5030.
- [45] *Balkovsky E., Fouxon A., Lebedev V.* Turbulent dynamics of polymer solutions // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — May. — Vol. 84, no. 20. — Pp. 4765–4768.
- [46] *Chertkov M.* Polymer stretching by turbulence // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 84, no. 20. — Pp. 4761–4764.
- [47] *Fouxon A., Lebedev V.* Spectra of turbulence in dilute polymer solutions // *Phys. Fluids.* — 2003. — Vol. 15. — Pp. 2060–2072.
- [48] *Shraiman B. I., Siggia E. D.* Scalar turbulence // *Nature.* — 2000. — Jun. — Vol. 405, no. 6787. — Pp. 639–646.

- [49] *Falkovich G., Gawedzki K., Vergassola M.* Particles and fields in fluid turbulence // *Rev. Mod. Phys.* — 2001. — Nov. — Vol. 73, no. 4. — Pp. 913–975.
- [50] *Batchelor G.* Small-scale variation of convected quantities like temperature in turbulent fluid. // *J. Fluid Mech.* — 1959. — Vol. 5. — Pp. 113–133.
- [51] *Kraichnan R.* Inertial ranges in two-dimensional turbulence // *Phys. Fluids.* — 1967. — Vol. 10, no. 7. — Pp. 1417–1423.
- [52] *Kraichnan R.* Inertial-range transfer in two- and three-dimensional turbulence // *J. Fluid Mech.* — 1971. — Vol. 47. — Pp. 525–535.
- [53] *Kraichnan R.* Statistical dynamics of two-dimensional turbulence // *J. Fluid Mech.* — 1975. — Vol. 67. — Pp. 155–175.
- [54] Statistics of a passive scalar advected by a large-scale two-dimensional velocity field: Analytic solution / M. Chertkov, G. Falkovich, I. Kolokolov, V. Lebedev // *Phys. Rev. E.* — 1995. — Vol. 51, no. 6. — Pp. 5609–5627.
- [55] *Eyink G., Xin J.* Self-similar decay in the kraichnan model of a passive scalar // *J. Stat. Phys.* — 2000. — Vol. 100, no. 3-4. — Pp. 679–741.
- [56] *Бэтчелор Д.* Введение в динамику жидкости. — Мир, 1973. — 760 с.
- [57] *Son D. T.* Turbulent decay of a passive scalar in the batchelor limit: Exact results from a quantum-mechanical approach // *Phys. Rev. E.* — 1999. — Vol. 59, no. 4. — Pp. R3811–R3814.
- [58] *Balkovsky E., Fouxon A.* Universal long-time properties of lagrangian statistics in the batchelor regime and their application to the passive scalar problem // *Phys. Rev. E.* — 1999. — Vol. 60, no. 4. — Pp. 4164–4174.
- [59] *Chertkov M., Lebedev V.* Decay of scalar turbulence revisited // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Jan. — Vol. 90, no. 3. — P. 034501.

- [60] *Chertkov M., Lebedev V.* Boundary effects on chaotic advection-diffusion chemical reactions // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Apr. — Vol. 90, no. 13. — P. 134501.
- [61] *Burghlea T., Segre E., Steinberg V.* Mixing by polymers: Experimental test of decay regime of mixing // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92. — P. 164501.
- [62] *Warner H.* Kinetic theory and rheology of dilute suspensions of finitely extensible dumbbells // *Ind. Eng. Chem. Fundam.* — 1972. — Vol. 11. — P. 379.
- [63] *Marko J. F., Siggia E. D.* Stretching DNA // *Macromolecules.* — 1995. — Vol. 28, no. 10. — Pp. 8759–8770.
- [64] *Hinch E.* Mechanical models of dilute polymer solutions for strong flows with large polymer deformations. // *Proc. Symp. Polymer Lubrification.* — 1974.
- [65] *Fuller G., Leal L.* Flow birefringence of dilute polymer solutions in two-dimensional flows // *Rheol. Acta.* — 80. — Vol. 19. — P. 580.
- [66] *Dunlap P., L.G. L.* Dilute polystyrene solutions in extensional flows: birefringence and flow modification // *J. Non-Newtonian Fluid Mech.* — 1986. — Vol. 23. — P. 5.
- [67] Visualization of molecular fluctuations near the critical point of the coil-stretch transition in polymer elongation / H. Babcock, R. Teixeira, J. Hur et al. // *Macromolecules.* — 2003. — Vol. 36. — P. 4544–4548.
- [68] *Groisman A., Steinberg V.* Stretching of polymers in a random three-dimensional flow // *Phys. Rev. Lett.* — 2001. — Vol. 86, no. 5. — Pp. 934–937.
- [69] *Groisman A., Steinberg V.* Elastic turbulence in curvilinear flows of polymer solutions // *New J. Phys.* — 2004. — Vol. 6.

- [70] *Hinch E., Leal L.* The effect of Brownian motion on the rheological properties of a suspension of non-spherical particles // *J. Fluid Mech.* — 1972. — Vol. 72. — Pp. 683–712.
- [71] *Balkovsky E., Fouxon A., Lebedev V.* Turbulence of polymer solutions // *Phys. Rev. E.* — 2001. — Vol. 64, no. 5. — P. 056301.
- [72] *Ellis R.* Entropy, Large Deviations and Statistical Mechanics. — Berlin: Springer Verlag, 1985.
- [73] *Puliافتo A., Turitsyn K.* Numerical study of polymer tumbling in linear shear flows // *Physica D.* — 2005. — Vol. 211, no. 1–2. — Pp. 9–22.
- [74] *Tolman R. C.* Duration of molecules in upper quantum states // *Phys. Rev.* — 1924. — Jun. — Vol. 23, no. 6. — Pp. 693–709.
- [75] *Bridgman P. W.* General considerations on the photo-electric effect // *Phys. Rev.* — 1928. — Jan. — Vol. 31, no. 1. — P. 90.
- [76] *Nyquist H.* Thermal agitation of electric charge in conductors // *Phys. Rev.* — 1928. — Jul. — Vol. 32, no. 1. — Pp. 110–113.
- [77] *Farago J.* Injected power fluctuations in Langevin equation // *J. Stat. Phys.* — 2002. — Vol. 107, no. 3–4. — Pp. 781–803.
- [78] *Farago J.* Power fluctuations in stochastic models of dissipative systems // *Physica A.* — 2004. — Vol. 331, no. 1–2. — Pp. 69–89.
- [79] *Монин А., Яглом А.* Статистическая гидромеханика: теория турбулентности. — М.: Наука, 1992. — 695 с.
- [80] *Фриш У.* Турбулентность: Наследие А.Н. Колгомогорова . — М.: Фазис, 1998. — 346 с.

- [81] *Gawedzki K., Kupiainen A.* Anomalous scaling of the passive scalar // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 75, no. 21. — Pp. 3834–3837.
- [82] *Shraiman B., Siggia E.* Anomalous scaling of a passive scalar in turbulent flow // *CRAS.* — 1995. — Vol. 321, no. 7. — Pp. 279–284.
- [83] Normal and anomalous scaling of the fourth-order correlation function of a randomly advected passive scalar / M. Chertkov, G. Falkovich, I. Kolokolov, V. Lebedev // *Phys. Rev. E.* — 1995. — Vol. 52, no. 5. — Pp. 4924–4941.