

ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ НАУКИ  
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики  
Российской академии наук (ИБРАЭ РАН)

---

На правах рукописи

УДК 544.034



Матвеев Александр Леонидович

**ПЕРЕНОС ПРИМЕСИ В СРЕДАХ С КРУПНОМАСШТАБНЫМИ  
НЕОДНОРОДНОСТЯМИ И СОРБИРУЮЩИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ**

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук  
Специальность 01.04.14 - Теплофизика и теоретическая теплотехника

Научный руководитель:

доктор физ.-мат. наук, профессор П. С. Кондратенко

г. Москва

2022

## ОГЛАВЛЕНИЕ

<b>ВВЕДЕНИЕ</b> .....	4
<b>1. КЛАССИЧЕСКИЙ ПЕРЕНОС ПРИМЕСИ В НЕОДНОРОДНОЙ ИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ</b> .....	12
1.1 Постановка задачи .....	13
1.2 Траектория концентрационного сигнала .....	14
1.3 Концентрация примеси в зависимости от размерности задачи .....	16
1.4 Численная реализация асимптотической теории .....	18
1.5 Классическая адвекция-диффузия в неоднородной изотропной среде .....	21
1.6 Выводы .....	22
<b>2. КЛАССИЧЕСКИЙ ДИФфузия в неоднородной анизотропной среде</b> .....	24
2.1 Постановка задачи. Квазиэйконал .....	24
2.2 Траектория концентрационного сигнала .....	25
2.3 Концентрация .....	27
2.4 Выводы .....	29
<b>3. МОДЕЛЬ ДЫХНЕ С КОЭФФИЦИЕНТАМИ ДИФфузии, ЗАВИСЯЩИМИ ОТ КООРДИНАТ</b> .....	30
3.1 Постановка задачи .....	30
3.2 Квазиэйконал .....	34
3.3 Концентрация примеси в асимптотическом пределе .....	36
3.4 Выводы .....	38
<b>4. ПЕРЕНОС ПРИМЕСИ В ТРЕЩИНОВАТО-ПОРИСТОЙ СРЕДЕ С СОРБИРУЮЩИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ</b> .....	40
4.1 Постановка задачи .....	41
4.2 Режимы переноса .....	48
4.3 Концентрация на асимптотически больших расстояниях .....	54

4.4 Выводы .....	58
<b>ЗАКЛЮЧЕНИЕ</b> .....	59
<b>БЛАГОДАРНОСТИ</b> .....	60
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 1</b> .....	61
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 2</b> .....	62
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 3</b> .....	63
<b>ПРИЛОЖЕНИЕ 4</b> .....	66
<b>Литература</b> .....	68
<b>ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ</b> .....	74

## ВВЕДЕНИЕ

### Актуальность темы

Несмотря на то, что первые работы по диффузии были опубликованы ещё в позапрошлом веке, исследования процессов переноса примеси продолжают и сейчас продолжают интенсивно развиваться.

Из уравнения классической диффузии, вытекающего из законов Фика [1], следует, что размер области локализации примеси  $R(t)$  растёт пропорционально квадратному корню из времени. Эта зависимость реализуется, когда среда переноса является однородной.

В сильно неоднородных средах, которые часто встречаются на практике, возникают неклассические зависимости:

$$R(t) \propto t^\gamma, \text{ где } \gamma \neq 1/2.$$

Если  $\gamma < 1/2$ , то режим переноса называют субдиффузионным, а при  $\gamma > 1/2$  – супердиффузионным. Для описания таких закономерностей было развито большое количество моделей в разных областях физики и не только. Так, перенос зарядов в полупроводниковых структурах [2-6], проникновение белков через клеточные мембраны [7-11], миграция примесей в пористых средах [12-13] описывался субдиффузионными режимами. Супердиффузионные режимы идентифицировались при движении микроорганизмов [14-15], распространении атомов и кластеров на поверхности твёрдых тел [16-17].

Особое положение в этом ряду занимают геологических среды [18], так как именно они рассматриваются в качестве места захоронения радиоактивных отходов, и знание закономерностей переноса радионуклидов в них исключительно важно для проведения оценок надёжности захоронений.

Приведенный выше далеко не полный перечень разделов знания, где встречаются неклассические процессы переноса, и беглый взгляд на историю их изучения (см. ниже Исторический обзор) свидетельствует о том, что эта тема исследований не только обширна, но и еще далека от своего завершения.

Режимы переноса, различаемые видом зависимости  $R(t)$ , и выбором моделей для их описания определяются распределением неоднородностей среды, иначе говоря, ее структурой. Обычно физическая модель переноса зависит от конечного набора

параметров. Если они являются постоянными, то концентрация примеси в зависимости от координат и времени, как правило, дается аналитическим выражением. Однако, на практике помимо мелко- и среднемасштабных неоднородностей, определяющих выбор модели, среда обладает крупномасштабными неоднородностями, так что параметры модели зависят от координат. Простейший пример – уравнение диффузии с непостоянным коэффициентом диффузии. В таком случае, решение задачи о переносе требует проведения трудоемких и время затратных численных расчетов. Отсюда возникает задача о построении аналитической теории переноса примеси в средах, обладающих крупномасштабными неоднородностями.

Во многих случаях геологические среды содержат в себе сильно сорбирующие включения. Обычно они бывают редкими, но в силу своей специфики могут в существенной мере влиять на формирования режимов переноса. Описание процессов переноса в таких средах требует разработки отдельной модели.

Всё сказанное позволяет считать тему диссертации, посвященной переносу примеси в средах с крупномасштабными неоднородностями и сорбирующими включениями, актуальной и важной для практики.

### **Исторический обзор**

Если первые работы по описанию процесса диффузии были выполнены Фиком ещё в 1855 году, то Ричардсон в 1926 году, по-видимому, впервые обнаружил отклонение дисперсии от классического закона диффузии [19]. Исследуя экспериментальные данные по распространению частиц в атмосфере, он пришел к заключению, что основной размер облака локализации примеси растёт со временем как  $\propto t^{\frac{3}{2}}$ , отличаясь от классической закономерности  $R(t) \propto \sqrt{t}$ . Данный результат на тот момент не вызвал особого интереса, и только спустя десятилетия он привлек внимание исследователей [20-25].

Первые теоретические работы по неклассическому переносу частиц в неоднородных средах были выполнены Шером и Монтроллом [26]. Они описывали особенности миграции примеси в твёрдых телах, которые наблюдались в экспериментах по измерению фотопроводимости аморфных полупроводников [2, 3]. Для этого ими был использован метод, предложенный в 1965 году Монтроллом и Вейсом. В дальнейшем этот метод стал известен как “continuous time random walks” (CTRW) [27], и в русскоязычной литературе известен как “случайные блуждания частицы в непрерывном времени”.

В модели CTRW рассматривается распространение отдельной частицы. В модели предполагается, что частица с некоторой вероятностью совершает скачки различной длины и длительности, распределенные случайным образом. В рамках данной модели функция распределения вероятностей времени ожидания между двумя последовательными прыжками и/или длины свободного пробега описывается степенной функцией. Впоследствии модель CTRW нашла приложение и в физике [28, 29], в биологии [30, 31] и экономике [32-36].

Далее, для описания переноса в неоднородных средах были предложены и другие методы, такие как модель дробного броуновского движения – fractional Brownian motion (FBM) [37, 38], обобщенное уравнение диффузии – generalized diffusion equation [39], уравнение Ланжевена – Langevin equation [40-43] и обобщенное уравнение Ланжевена – generalized Langevin equation [44-47], обобщенные кинетические уравнения – generalized master equations (GME) [48, 49]. Эти методы имеют свои преимущества и недостатки, которые широко обсуждаются в литературе (см. например [50-52] и др.). Отметим наиболее важные моменты. Так как в моделях CTRW и GME достаточно проблематично учесть внешние силы и граничные условия, то возникают трудности при решении конкретных задач переноса. Кроме того при описании систем со сложной динамикой, данные модели не позволяют учесть смену режимов переноса во времени.

В последнее время при анализе переноса в неоднородных средах большой популярностью пользуются феноменологические подходы, основанные на уравнениях в дробных производных [53-60]. Одним из наиболее известных является уравнение Фоккера-Планка в дробных производных [59, 60]. В отличие от CTRW, учет начальных и граничных условий в данном методе не вызывает затруднений. Ограничение метода состоит в том, что уравнение Фоккера-Планка в дробных производных применимо для описания процессов переноса только в том случае, когда потенциал (внешнее поле) не зависит от времени [61]. Кроме того из результатов этой модели следует, что концентрация на асимптотически далеких расстояниях от источника примеси убывает степенным образом. Однако полученный результат не удалось обосновать физически.

При описании переноса в неоднородных средах особую роль играют модели приближения двупористой среды, когда полагается, что среда миграции состоит из двух подсистем: 1) сетки проводящих каналов и 2) пористой матрицы, заполняющей пространство между каналами.

Впервые такие среды были рассмотрены Баренблаттом с соавторами [62] для моделирования фильтрации жидкости в неоднородных геологических средах. Для описания переноса примесей модель двойной пористости была предложена в работе Герке

и ван-Генухтена [63]. В исходной модели Герке и ван-Генухтена [63], а также в работе Симунека и ван-Генухтена [64] распределение примесей описывалось локальными средними концентрациями (усредненными по масштабам, превышающим характерный размер блоков) в каждой подсистеме. Скорость обмена примесей между подсистемами определялась разницей между средними локальными концентрациями. Такой подход дает удовлетворительное приближение для описания переноса примеси на больших временах, когда локальными градиентами концентрации на масштабах отдельных блоков можно пренебречь. Однако нетрудно показать, что из-за медленного процесса молекулярной диффузии в блоках эти градиенты могут сохраняться достаточно длительное время и будут сильно влиять на процесс переноса.

Для учета указанных мелкомасштабных градиентов было предложено большое количество моделей, которые обычно называют неравновесными моделями двойной пористости. Целью этих моделей было выявить функцию, определяющую обмен примесью между высокопроницаемыми (подвижными) и слабопроницаемыми (неподвижными) подсистемами. Некоторые представления этой функции были сделаны на основе прямого решения задачи диффузии внутри блоков стандартной формы (плоской, цилиндрической, сферической, как, например, в работах Гольца и Робертса [65]; Кареры с соавторами [66]; Харви и Горелика [67]; Денцарда и Берковица [68]). В работе [37] было предложено использовать интегральное представление с ядром в виде общей обратно-степенной функции времени. В работе Донадо с соавторами [69] был предложен вариант модели, в которых обмен примесью между подсистемами описывался путем введения набора функций, характеризующихся разными скоростями обмена. И до сих пор идет поток исследований, решающих данную проблему как численно, так и аналитически [70-72].

В общем случае функции обмена примесей и, следовательно, характер переноса зависят от формы и распределения неоднородностей, их транспортных и сорбционных свойств и механизмов переноса примесей. В работах Л.В. Матвеева [73,74] впервые предложена неравновесная модель переноса примеси в статистически однородной трещиновато-пористой среде. Среда рассматривалась как совокупность двух подсистем – сильно проницаемая система трещин и слабо проницаемая матрица, между которыми происходит обмен примесью. Важно отметить, что при фиксированных свойствах среды режим переноса меняется со временем (см. также [75]). В зависимости от временного интервала реализуется последовательность режимов, включая адвекцию-диффузию, квазидиффузию, субдиффузию а также медленную адвекцию-диффузию.

Кроме аналитических моделей, в литературе имеется большое количество работ, посвященных численному моделированию переноса примеси в неоднородных средах. В работе [76] предложена численная модель, в которой примесь была условно разделена на подвижную и неподвижную фракции, между которыми учитывался обмен с конечной скоростью. Другим примером является работа [77], в которой для расчета переноса примеси предложен матричный метод.

В работе [78] с целью обоснования безопасного захоронения радионуклидов в геологических средах был проведен расчет переноса примеси в Нижнеканском горном массиве.

При описании переноса в геологических средах особый интерес представляют задачи, когда пространственные масштабы изменения характеристик среды сравнимы или превышают размер основной области локализации примеси. Для решения таких задач в работе П.С. Кондратенко [79] был предложен асимптотический подход. В нем выражение для концентрации сведено к однократным (линейным) интегралам вдоль характеристической линии – траектории концентрационного сигнала. Сама траектория определяется из обыкновенного дифференциального уравнения, вытекающего из вариационного принципа.

Предложенный исторический обзор подтверждает вывод о том, что тема предпринятого в диссертации исследования переноса примеси в неоднородных средах является актуальной.

### **Цель работы.**

Теоретическое исследование закономерностей переноса примеси в средах, обладающих крупномасштабными неоднородностями, и в присутствии редких сильно сорбирующих включений.

### **Основными задачами диссертации являются:**

1. Построение асимптотической теории переноса примеси, обусловленного классической диффузией, в неоднородных изотропных и анизотропных средах.
2. Получение асимптотической формулы для концентрации примеси в задаче об адвекции-диффузии в неоднородной среде.
3. Разработка асимптотической теории для модели регулярно неоднородной резко контрастной среды с параметрами, зависящими от координат.

4. Анализ переноса примеси в трещиновато-пористой среде с редкими сильно сорбирующими включениями.

### **Научная новизна**

Автором впервые:

1. Построена асимптотическая теория переноса примеси, обусловленного классической диффузией, в неоднородных изотропных и анизотропных средах.
2. Получена асимптотическая формула для концентрации примеси в задаче об адвекции-диффузии в неоднородной среде.
3. Исследованы закономерности переноса примеси в модели регулярно неоднородной резко контрастной среды (модели Дыхне) с параметрами, зависящими от координат.
4. Проанализированы закономерности переноса примеси в трещиновато-пористой среде с редкими сильно сорбирующими включениями.

### **Практическая ценность**

1. Установленные в работе аналитические результаты являются универсальными и могут быть использованы для решения широкого круга задач о переносе примеси в средах с крупномасштабными неоднородностями.
2. Полученные результаты дают возможность проведения быстрых качественных оценок для характеристик переноса радионуклидов и других загрязнений в геологических средах.
3. Полученные результаты могут быть применены как для усовершенствования существующих, так и для создания новых численных кодов, предназначенных для моделирования процессов переноса примеси в геологических средах.

### **Личный вклад автора состоит в следующем:**

1. Построена асимптотическая теория переноса примеси при классической диффузии в неоднородной изотропной среде.
2. Разработана асимптотическая теория анизотропной классической диффузии в среде с крупномасштабными неоднородностями.

3. Решена задача о переносе примеси в регулярно неоднородной резко-контрастной среде с параметрами, зависящими от координат.
4. Исследовано влияние редких сильно сорбирующих включений на режимы переноса и получены выражения для концентрации на асимптотически больших расстояниях в трещиновато-пористой среде.

#### **Основные положения, выносимые на защиту:**

1. Концентрация примеси в задаче о классической диффузии в среде с крупномасштабными неоднородностями на асимптотически больших расстояниях сводится к однократным интегралам вдоль характеристической кривой - траектории концентрационного сигнала. Сама траектория определяется из обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка.
2. В задаче об адвекции-диффузии, при слабой зависимости скорости от координат, концентрация примеси на больших временах описывается классической формулой, в которой величина расплывания области локализации примеси определяется интегралом от зависящего от координат коэффициента диффузии вдоль траектории центра масс примеси.
3. При анизотропной диффузии, когда источник примеси и точка наблюдения лежат по разные стороны плоской границы между средами с различающимися тензорами диффузии, траектория концентрационного сигнала при пересечении границы терпит излом, но, в отличие от изотропной диффузии, в общем случае не лежит в плоскости, перпендикулярной границе раздела.
4. В асимптотической теории переноса в регулярно неоднородной резко контрастной среде с параметрами, зависящими от координат, траектория концентрационного сигнала на относительно ранних временах является плоской, а на поздних – объемной.
5. В трещиновато-пористых средах с редкими сильно сорбирующими включениями, в случае, когда сорбционная емкость превышает критическую величину, на поздних временах реализуются два дополнительных режима переноса – медленная квазидиффузия и замедленная адвекция-диффузия, обусловленные сорбирующими включениями.

#### **Достоверность результатов**

Достоверность результатов базируется на применении современных методов теоретической и математической физики, а также на согласии с численными расчетами.

## **Публикации и апробация работы**

По теме диссертации опубликовано 8 печатных работ, 5 из них в изданиях из списка, рекомендованного ВАК Минобрнауки России.

Основные результаты работы были представлены на ежегодной конференции молодых ученых ИБРАЭ РАН (Москва, 2019), 61-ой научной конференции МФТИ (Долгопрудный, 2018), 62-ой научной конференции МФТИ (Долгопрудный, 2019), 63-ой научной конференции МФТИ (Долгопрудный, 2020), 64-ой научной конференции МФТИ (Долгопрудный, 2021).

## **План работы**

**Глава 1** посвящена исследованию переноса примеси, обусловленного диффузией и адвекцией, в изотропной среде с крупномасштабными неоднородностями.

В **Главе 2** построена асимптотическая теория анизотропной диффузии в неоднородной среде.

**Глава 3** посвящена разработке асимптотической теории для модели регулярно неоднородной резко контрастной среды (модели Дыхне) с параметрами, зависящими от координат.

В **Главе 4** исследованы закономерности переноса примеси в трещиновато-пористой среде с крупномасштабными сорбирующими включениями.

## ГЛАВА 1

### КЛАССИЧЕСКИЙ ПЕРЕНОС ПРИМЕСИ В НЕОДНОРОДНОЙ ИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ

Аналитическое решение задачи о классической адвекции-диффузии примеси в однородной среде хорошо известно. Для задач переноса примеси в неоднородных средах применяют численные решения уравнений в частных производных второго порядка, для чего требуются существенные вычисленные мощности.

В работе [79] был впервые предложен асимптотический подход к описанию процессов переноса примеси в средах с крупномасштабными неоднородностями. Он применим на расстояниях до источника примеси, значительно превосходящих размер основной области локализации примеси. В этой области формирование концентрации обусловлено коротковолновой частью механизма переноса, и зависимость концентрации от расстояния представима в виде произведения убывающей экспоненты с показателем, значительно больше единицы, и относительно медленно меняющегося с расстоянием предэкспоненциального множителя. Результат для концентрации сведен к однократным интегралам вдоль специальной линии – траектории концентрационного сигнала. Эта траектория определяется из вариационного принципа, приводящего к обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка для единичного вектора касательной к самой траектории. Такой подход к теории процессов переноса по форме близок к приближению геометрической оптики в электродинамике [80] и квазиклассическому приближению в квантовой механике [81]. Сведение задачи о переносе примеси к обыкновенному дифференциальному уравнению первого порядка существенно упрощает процедуру численных расчетов применительно к средам, обладающим крупномасштабными неоднородностями. Отметим, что в работе [79] асимптотический подход был продемонстрирован на модели случайной адвекции, в которой реализуется супердиффузионный режим переноса.

Целью настоящей главы является построение асимптотической теории переноса примеси на основе классической изотропной диффузии в неоднородной среде. Далее в разделе 1.1 сформулирована постановка задачи. В разделе 1.2 выводится уравнение для траектории концентрационного сигнала. В разделе 1.3 получено выражение для концентрации для различных размерностей пространства. В разделе 1.4 приведены результаты численной реализации асимптотической теории и их сравнение с результатами прямых численных расчетов на основе уравнения диффузии в неоднородной среде. В

разделе 1.5 дан вывод формулы для концентрации в задаче об адвекции-диффузии в неоднородной среде. В заключительном разделе кратко подведены итоги главы.

### 1.1 Постановка задачи

Концентрация примеси удовлетворяет известному уравнению

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} = \text{div}(D \nabla c(\vec{r}, t)), \quad (1.1)$$

где коэффициент диффузии является функцией координат,  $D = D(\vec{r})$ . Считаем, что в начальный момент времени вся примесь сосредоточена в начале координат.

$$c(\vec{r}, 0) = N \delta(\vec{r}), \quad (1.2)$$

где  $N$  - полное число частиц примеси.

В представлении Лапласа,  $c_p(\vec{r}) = \int_0^{\infty} dt c(\vec{r}, t) e^{-pt}$ , уравнение (1.1) с учетом (1.2)

принимает вид:

$$pc_p(\vec{r}) - \text{div}\{D(\vec{r}) \nabla c_p(\vec{r})\} = N \delta(\vec{r}). \quad (1.3)$$

Нас будет интересовать концентрация на асимптотически далеких расстояниях от источника примеси, когда  $r \gg R(t)$ , где  $R(t)$  - размер основной области ее локализации в момент времени  $t$ . Тогда решение уравнения (1.3) удобно представить в форме:

$$c_p(\vec{r}) = A_p(\vec{r}) e^{-\Gamma_p(\vec{r})}, \quad \Gamma_p(\vec{r}) \gg 1. \quad (1.4)$$

Благодаря неравенству  $\Gamma_p(\vec{r}) \gg 1$  возникает малый параметр

$$\xi = \left( |\nabla \Gamma_p| \min(L, |\vec{r}|) \right)^{-1}, \quad \xi \ll 1. \quad (1.5)$$

где  $L$  - характерный масштаб длины, на котором заметно меняется коэффициент диффузии. Выполнение условия  $\xi \ll 1$  лежит в основе теорий, разрабатываемых в этой и последующих двух главах. Подставляя (1.4) в (1.3), в нулевом порядке по параметру  $\xi$  приходим к уравнению в частных производных первого порядка для показателя экспоненты  $\Gamma_p(\vec{r})$ :

$$p - D(\vec{r}) (\nabla \Gamma_p(\vec{r}))^2 = 0. \quad (1.6)$$

Отсюда следует, что

$$\nabla \Gamma_p(\vec{r}) = \sqrt{\frac{p}{D(0)}} n(\vec{r}) \vec{v}(\vec{r}), \quad n(\vec{r}) = \sqrt{\frac{D(0)}{D(\vec{r})}}, \quad \vec{v}^2(\vec{r}) = 1. \quad (1.7)$$

## 1.2 Траектория концентрационного сигнала

Уравнение (1.6) по своей форме аналогично уравнению эйконала в геометрической оптике [80] (или уравнению Гамильтона – Якоби в классической механике [82]). Соответственно, роль эйконала в задаче о диффузии в неоднородной среде играет функция  $\Gamma_p(\vec{r})$ , а величина  $n(\vec{r})$  из (1.7) является аналогом показателя преломления. В дальнейшем функцию  $\Gamma_p(\vec{r})$  будем называть квазиэйконалom. Решение уравнения (1.6) с учетом (1.7) для функции квазиэйконала сводится к одномерному (линейному) интегралу

$$\Gamma_p(\vec{r}) = \sqrt{\frac{p}{D(0)}} \psi(\vec{r}), \quad \psi(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} dl n(\vec{r}) \quad (1.8)$$

вдоль линии от источника до точки наблюдения. При этом линия, определяется из условия минимума интеграла  $\psi(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} dl n(\vec{r})$ :

$$\delta_l \psi(\vec{r}) \equiv \delta_l \int_0^{\vec{r}} dl n(\vec{r}) = 0. \quad (1.9)$$

Величина  $dl$  в (1.8) и (1.9) является дифференциальным элементом указанной линии, а единичный вектор  $\vec{v}(\vec{r})$  из (1.7) направлен по касательной к ней. Эта линия является аналогом траектории луча в геометрической оптике, а в задаче о переносе примеси будем ее называть траекторией концентрационного сигнала. Условие (1.9) является аналогом принципа Ферма в геометрической оптике [80], или - Мопертюи в классической механике [82].

Подобно геометрической оптике (см. [80]), из соотношения (1.9) вытекает обыкновенное дифференциальное уравнение для траектории

$$\frac{d\vec{v}}{dl} = \frac{1}{n} (\nabla n - \vec{v}(\vec{v} \nabla n)). \quad (1.10)$$

Из условия (1.9) и уравнения (1.10) видно, что в однородной среде, когда  $n(\vec{r}) = 1$ ,  $\vec{v} = const$ , и траектория концентрационного сигнала является отрезком прямой линии, соединяющим точку наблюдения с источником. При этом  $\vec{v} = \frac{\vec{r}}{r}$ .

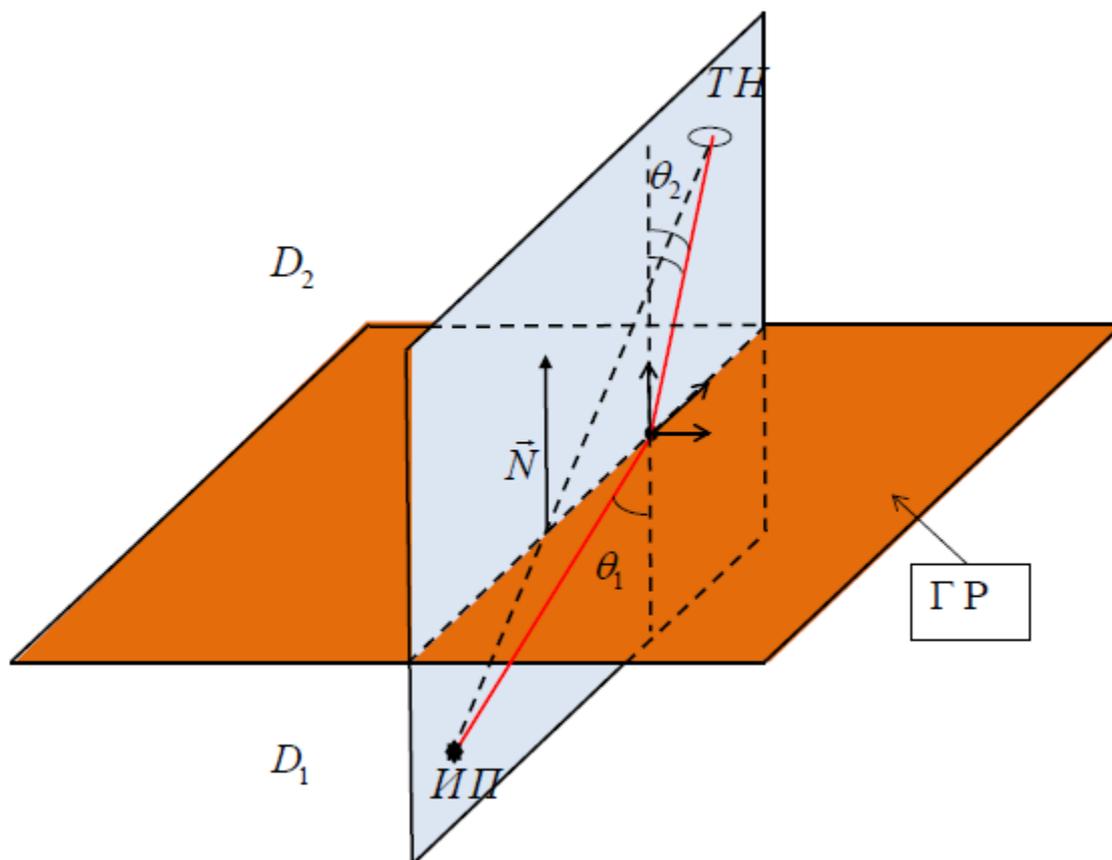


Рис.1.1. Преломление концентрационного сигнала на границе двух однородных изотропных сред с коэффициентами диффузии  $D_1$  и  $D_2$ , закон Снеллиуса.  $ИП$  - источник,  $ТН$  - точка наблюдения,  $ГР$  - граница раздела между средами, — - траектория концентрационного сигнала.

Из условия (1.9), а также (1.10) следует, что в случае, когда между источником и точкой наблюдения имеется поверхность, где коэффициент диффузии терпит скачок, траектория концентрационного сигнала в точке пересечения указанной поверхности испытывает излом, который описывается формулой, аналогичной закону Снеллиуса:

$$\frac{\sin \theta_1}{\sqrt{D_1}} = \frac{\sin \theta_2}{\sqrt{D_2}}. \quad (1.11)$$

Здесь  $D_1$ ,  $D_2$  - коэффициенты диффузии по разные ее стороны границы,  $\theta_1$ ,  $\theta_2$  - углы между линией концентрационного сигнала и нормалью к поверхности границы по соответствующим ее сторонам (см. Рис.1.1). Существенно, что плоскость, которой

принадлежит траектория концентрационного сигнала перпендикулярна границе раздела. Определение ориентации этой плоскости базируется на том, она должна содержать две точки – источник и точку наблюдения и что, кроме того, в задаче имеется выделенное направление – нормаль к границе между средами. Никаких других выделенных направлений в задаче нет. Отметим, что в традиционной постановке задачи из геометрической оптики вместо двух точек, принадлежащих плоскости, есть направление падающего на границу луча.

### 1.3 Концентрация примеси в зависимости от размерности задачи

Поскольку численная реализация асимптотической теории классической диффузии, которой посвящен следующий раздел, проводилась в пространственных размерностях  $\delta = 1, 2$ , в этом разделе будет получено выражение для концентрации при  $\delta = 1, 2, 3$ .

Начнём с вычисления предэкспоненциального множителя  $A_p(\vec{r})$  в выражении (1.4). С этой целью подставим (1.4) в (1.3) и отберем слагаемые, которые по сравнению с уравнением (1.6) имеют следующий (первый) порядок малости по параметру  $\xi$ , определенному равенством (1.5). В результате, приходим к уравнению

$$2D(\vec{r})\nabla\Gamma_p\nabla A_p(\vec{r}) + A_p(\vec{r})\nabla\Gamma_p\nabla D(\vec{r}) + D(\vec{r})A_p(\vec{r})\Delta\Gamma_p = 0. \quad (1.12)$$

После подстановки (1.7) в (1.12), имеем обыкновенное дифференциальное уравнение первого порядка

$$2\frac{d\ln(A_p(\vec{r}))}{d\psi} + \operatorname{div}\left(\frac{\vec{v}(\vec{r})}{n(\vec{r})}\right) = 0. \quad (1.13)$$

Здесь  $\frac{d}{d\psi(\vec{r})} = \frac{d}{n(\vec{r})dl} = \frac{(\vec{v}(\vec{r}), \nabla)}{n(\vec{r})}$  - производная вдоль линии концентрационного сигнала.

Для получения решения уравнения (1.13) в явном виде требуется знать поведение в нем второго слагаемого слева при  $\vec{r} \rightarrow 0$ . С этой целью заметим, что при  $r \ll L$  среду можно приближенно считать однородной, а это значит, что  $n \cong 1$ ,  $\psi \cong r$ ,  $\vec{v} \cong \frac{\vec{r}}{r}$ , и тогда

$$\operatorname{div}\frac{\vec{v}(\vec{r})}{n(\vec{r})} \cong \frac{\delta-1}{\psi} \quad \text{при } r \ll L. \quad (1.14)$$

Поэтому прежде, чем интегрировать второе слагаемое слева в (1.13) в пределах от 0 до  $\bar{r}$ , с целью компенсации расходимости на нижнем пределе вычтем из подынтегрального выражения  $\frac{\delta-1}{\psi}$ , а после взятия интеграла добавим к результату величину  $(\delta-1)\ln\psi$ , получившуюся от подстановки на верхнем пределе. В итоге придем к результату:

$$A_p(\bar{r}) = \frac{B_p}{\psi^{\frac{\delta-1}{2}}(\bar{r})} \exp[-H(\bar{r})], \quad (1.15)$$

где

$$H(\bar{r}) = \frac{1}{2} \int_0^{\psi(\bar{r})} d\psi \left( \operatorname{div} \left( \frac{\vec{v}(\bar{r})}{n(\bar{r})} \right) - \frac{\delta-1}{\psi} \right). \quad (1.16)$$

Подставляя (1.8) и (1.15) в (1.4), приходим к выражению для концентрации в представлении Лапласа:

$$c_p(\bar{r}) = \frac{B_p}{\psi^{\frac{\delta-1}{2}}(\bar{r})} \exp \left[ -\sqrt{\frac{p}{D(0)}} \psi(\bar{r}) - H(\bar{r}) \right], \quad (1.17)$$

Отметим, что, что как следует из равенства (1.16) с учетом (1.14), в однородной среде имеет место равенство  $H(\bar{r}) = 0$ . С учетом этого факта, а также (1.14), из равенства (1.17) вытекает, что концентрация примеси при диффузии в однородной среде в представлении Лапласа -  $\tilde{c}_p(\bar{r})$  дается выражением

$$\tilde{c}_p(\bar{r}) = \frac{B_p}{r^{\frac{\delta-1}{2}}} \exp \left[ -\sqrt{\frac{p}{D(0)}} r \right]. \quad (1.18)$$

Эквивалент этого выражения в пространственно-временном представлении -  $\tilde{c}(\bar{r}, t)$  вычислен в приложении П1 и дается формулой (П.1.3). Отметим, что выражения (1.17) и (1.18) имеют одинаковые зависимости от Лапласовской переменной. Из всего сказанного вытекает, что формула для концентрации в пространственно-временном представлении при диффузии в среде с крупномасштабными неоднородностями  $c(\bar{r}, t)$  получается из (П.1.3) путем замены  $r \rightarrow \psi$  и введения дополнительного множителя  $\exp[-H(\bar{r})]$ . В итоге приходим к выражению:

$$c(\vec{r}, t) = \frac{N}{(4\pi D(0)t)^{\frac{s}{2}}} \exp\left[-\frac{\psi^2(\vec{r})}{4D(0)t} - H(\vec{r})\right]. \quad (1.19)$$

#### 1.4 Численная реализация асимптотической теории

В этом разделе проведено сравнение распределения концентрации, рассчитанного двумя способами: на основе асимптотической теории и путем прямого численного решения исходной задачи диффузии (уравнения в частных производных второго порядка) с коэффициентом диффузии зависящим от координат. Сравнение проведено для одномерного и двумерного случаев.

В одномерном случае, была выбрана следующая зависимость коэффициента диффузии от координаты

$$D(x) = D_0 \left( \frac{e^{\frac{x}{a}}}{1 + b \left( e^{\frac{x}{a}} - 1 \right)} \right)^2. \quad (1.20)$$

Исходя из этого выражения, и, используя соотношения (1.7) и (1.8), было получено соотношение для интеграла вдоль траектории концентрационного сигнала

$$\psi(x) = bx + a(1-b) \left( 1 - e^{-\frac{x}{a}} \right), \quad (1.21)$$

и в итоге, согласно (1.19) выражение для концентрации приняло вид:

$$c(x, t) = \frac{N}{(4\pi D_0 t)^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{1}{4D_0 t} \left( bx + a(1-b) \left( 1 - e^{-\frac{x}{a}} \right) \right)^2\right). \quad (1.22)$$

На рис.1.2 проведён сравнительный анализ распределения концентрации, полученной при помощи прямого численного решения уравнения в частных производных второго порядка, (синий цвет) и аналитического выражения (1.22) (красный цвет). Как видно из указанного рисунка, что с увеличением расстояния точность выражения для концентрации, полученного из формулы (1.22), растёт. Это естественно, поскольку асимптотическая теория предназначена для описания распределения концентрации на далеких расстояниях от источника.

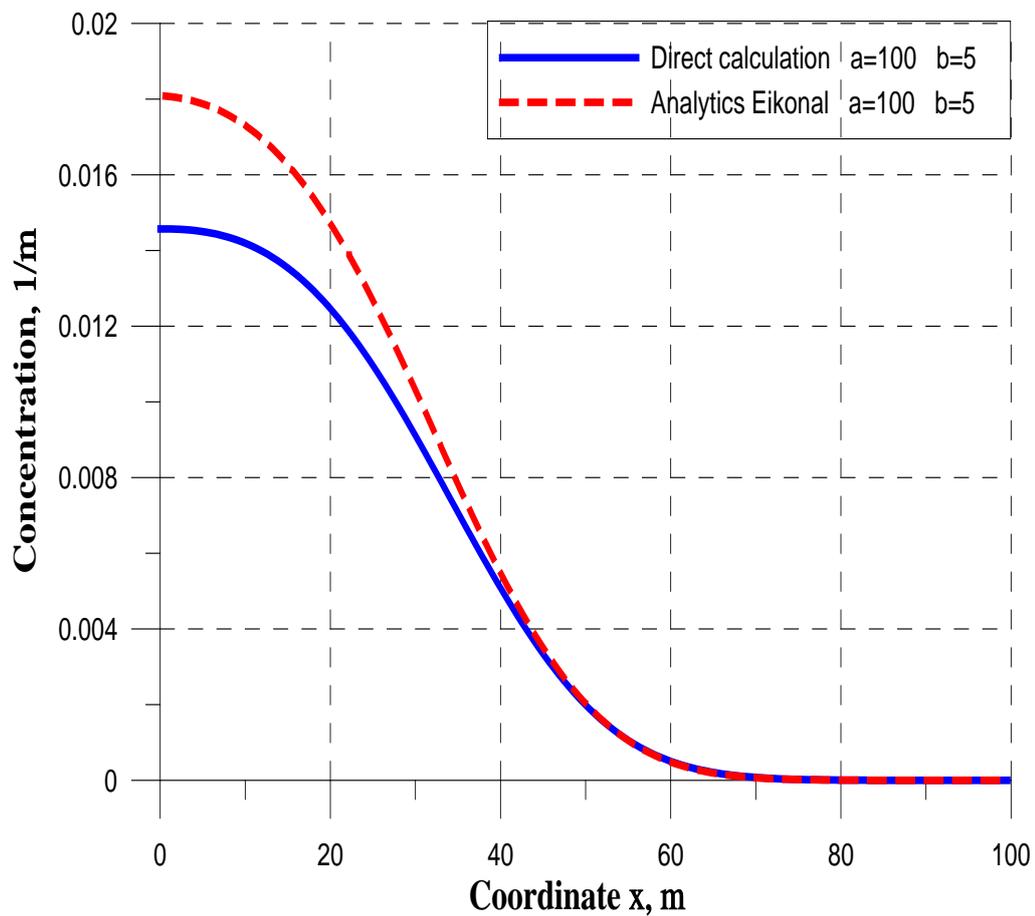


Рис. 1.2 Результаты прямого численного расчёта и асимптотического решения для одномерного случая на временах  $t=10^9$  s.

Аналогичным способом проводилось сравнение результатов, полученных на основе асимптотической теории и путем прямого численного расчета, в двумерном случае. Зависимость коэффициента диффузии от координат была выбрана следующей:

$$D(\vec{r}) = D_0\theta(x_1 - x) + \frac{(x_2 - x)D_0 + (x - x_1)D_1}{x_2 - x_1}\theta(x - x_1)\theta(x_2 - x) + D_1\theta(x - x_2), \quad (1.23)$$

где  $\theta(u)$  - функция Хэвисайда:

$$\theta(u) = \begin{cases} 1, & u > 0; \\ 0, & u < 0 \end{cases}$$

Зависимость (1.23) изображена на Рис. 1.3.

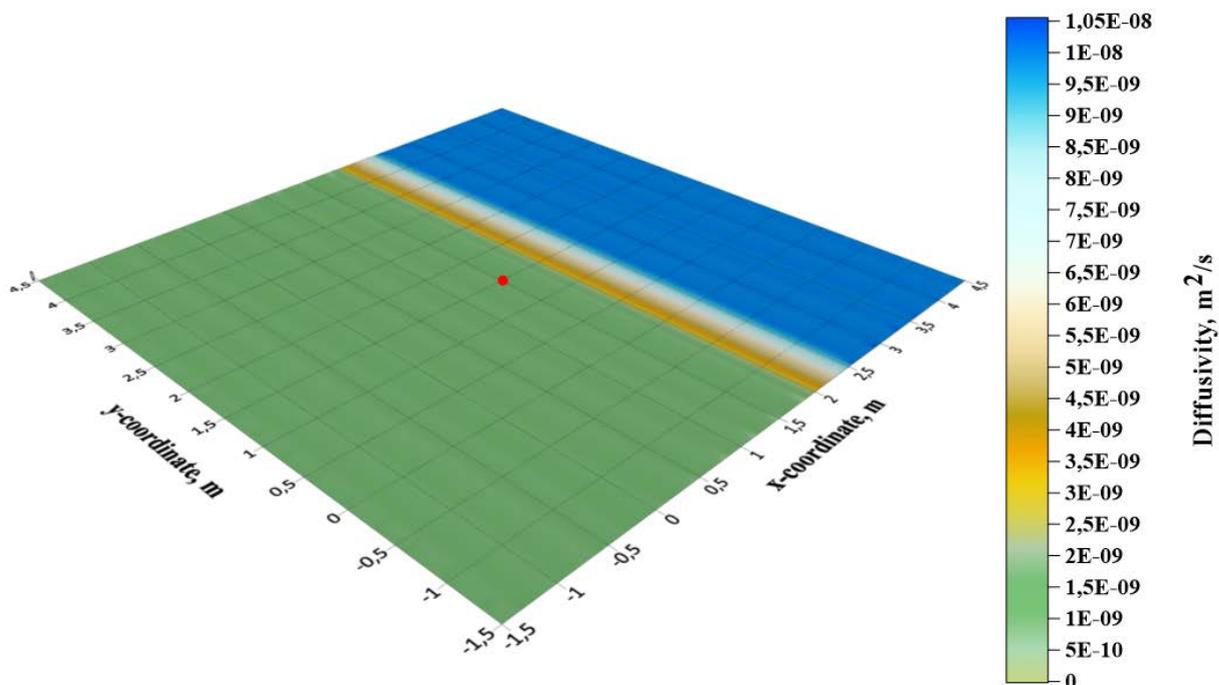


Рис.1.3. Графическое изображение координатной зависимости коэффициента диффузии (1.23). Красный кружок обозначает источник примеси.

На Рис.1.4 показаны распределения концентрации, полученные с помощью асимптотического метода (красный цвет) и численного расчёта уравнения диффузии (чёрный цвет). Из графика видно, что расчёт, проведенный на основе асимптотического метода, описывает распределение концентрации с высокой точностью.

Важно подчеркнуть, что скорость расчёта, основанного на асимптотическом методе, на 2 порядка выше скорости расчёта, полученного при численном решении уравнения второго порядка. Это делает применение данного метода в численных расчетах весьма многообещающим.

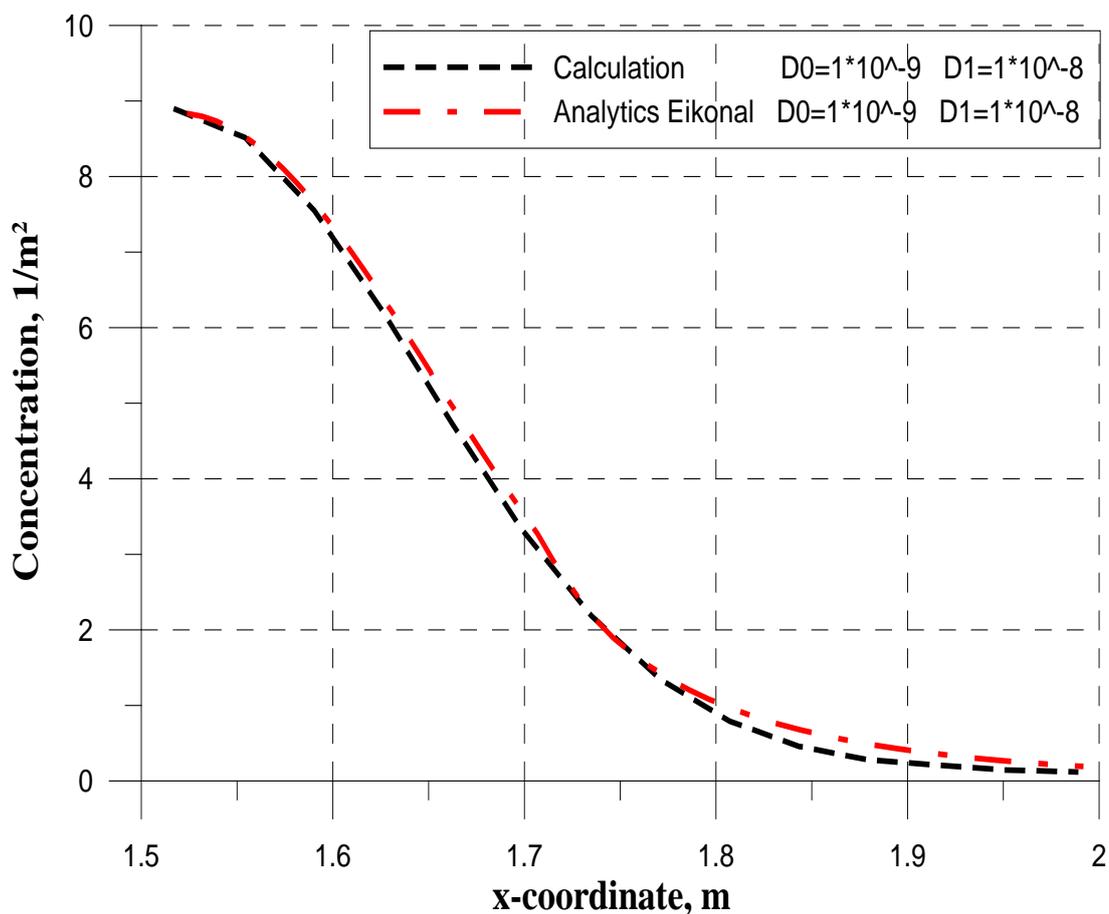


Рис. 1.4. Результаты, полученные путем прямого численного расчёта и на основе асимптотической теории в двумерном случае. **Calculation** – прямой численный расчет, **Analytics Eikonal** – расчет на основе асимптотической теории.

### 1.5 Классическая адвекция-диффузия в неоднородной изотропной среде

В этом разделе при определенных ограничениях на параметры задачи будет рассмотрены характеристики переноса примеси на основе классической адвекции-диффузии. После добавления в уравнение (1.1) слагаемого, ответственного за адвекцию, оно приобретает вид

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(\vec{u}c - D\nabla c) = 0, \quad (1.24)$$

где скорость адвекции, как и коэффициент диффузии, являются функциями координат  $\vec{u} = \vec{u}(\vec{r})$ ,  $D = D(\vec{r})$ . Как и ранее, начальное условие соответствует равенству (1.2).

На относительно ранних временах, когда  $t \ll \frac{D}{u^2}$ , адвективным слагаемым в уравнении (1.24) можно пренебречь, и тогда задача сводится к уже рассмотренной в предыдущих разделах этой главы. Рассмотрим далее перенос примеси на поздних временах  $t \gg \frac{D}{u^2}$ , потребовав выполнения следующих неравенств:

$$ut \ll L_u, \quad |\vec{r} - \vec{u}t| \ll L_D. \quad (1.25)$$

Здесь  $L_u$  и  $L_D$  - характерные масштабы длины, на которых заметно меняются, соответственно, скорость адвекции и коэффициент диффузии. Условия (1.25) позволяют перейти в уравнении (1.24) в движущуюся систему координат

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r} - \vec{u}t. \quad (1.5)$$

В итоге, уравнение (1.24) с учетом второго из неравенств (1.25) приобретает вид

$$\left( \frac{\partial}{\partial t} - D(\vec{u}t) \Delta_{\vec{r}'} \right) c(\vec{r}', t) = 0. \quad (1.27)$$

Решением этого уравнения является выражение:

$$c(\vec{r}, t) = N (4\pi D_0 \tilde{t})^{-\frac{3}{2}} \exp \left[ -\frac{(\vec{r} - \vec{u}t)^2}{4D_0 \tilde{t}(t)} \right], \quad (1.28)$$

где

$$\tilde{t}(t) = \int_0^t dt' \left( \frac{D(\vec{u}t')}{D_0} \right). \quad (1.29)$$

Формулы (1.28) и (1.29) сохраняют самостоятельный смысл при выполнении неравенства

$$L_D \ll L_u. \quad (1.30)$$

В противном случае, когда  $L_D \sim L_u$ , они сводятся к решению уравнения адвекции-диффузии в однородной среде.

## 1.6 Выводы

Решение задачи о классической диффузии на основе асимптотического подхода [76] на расстояниях, значительно превосходящих размер основной области локализации примеси, сведено к интегралам вдоль линии, условно названной траекторией концентрационного сигнала. Сама траектория определяется из обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка. Уравнение вытекает из вариационного

принципа, который является аналогом принципа Ферма в геометрической оптике, или Мопертюи в классической механике.

Решение задачи об адвекции-диффузии в неоднородных средах при определенных ограничительных условиях сведено к классической формуле, в которой элемент, описывающий дисперсию примеси, сведен к линейному интегралу от коэффициента диффузии вдоль адвекционного смещения примеси.

Численная реализация показала, что по сравнению с прямыми численными расчетами классической диффузии в неоднородных средах применение асимптотической теории приводит к существенному сокращению расчетного времени.

## ГЛАВА 2

### КЛАССИЧЕСКАЯ ДИФФУЗИЯ В НЕОДНОРОДНОЙ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЕ

Цель настоящей главы состоит в обобщении асимптотической теории классической диффузии на случай анизотропной среды.

В разделе 2.1 сформулирована постановка задачи и дан вывод уравнения для квазиэйконала. В разделе 2.2 получено уравнение для траектории концентрационного сигнала. В разделе 2.3 найдено выражение для концентрации в пространственно-временном представлении. В заключительном разделе подведены итоги.

#### 2.1 Постановка задачи. Квазиэйконал

В анизотропной среде коэффициент диффузии является симметричным тензором второго ранга. Соответственно, уравнение диффузии имеет вид:

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} = \partial_i (D^{ik}(\vec{r}) \partial_k c(\vec{r}, t)). \quad (2.1)$$

Здесь  $x^k$  - компоненты радиус-вектора,  $k = 1, 2, 3$ ,  $\partial_i = \frac{\partial}{\partial x^i}$ ,  $D^{ij} = D^{ij}(\vec{r})$  - тензор диффузии. По повторяющимся индексам, как обычно, происходит суммирование. Далее мы будем придерживаться формализма криволинейной геометрии, используемого в общей теории относительности [83].

Задав начальное условие в форме (1.2), перепишем уравнение (2.1) в представлении Лапласа

$$p c_p(\vec{r}) - \partial_i (D^{ik}(\vec{r}) \partial_k c(\vec{r}, t)) = N \delta(\vec{r}). \quad (2.2)$$

На асимптотически далеких расстояниях от источника концентрацию примеси, как обычно, ищем в виде (1.4). После подстановки этого выражения в уравнение (2.2) в нулевом приближении по малому параметру  $\xi$ , определенному равенством (1.5), приходим к уравнению в частных производных первого порядка для квазиэйконала  $\Gamma_p(\vec{r})$ :

$$p - D^{ik}(\vec{r}) \partial_i \Gamma_p(\vec{r}) \partial_k \Gamma_p(\vec{r}) = 0 \quad (2.3)$$

Зададим 3-вектор  $u^i$ , касательный к траектории  $x^i(s)$  концентрационного сигнала, равенством

$$u^i = g^{ik} \partial_k \Gamma_p(\vec{r}), \quad (2.4)$$

где введена эффективная метрика:

$$ds^2 = g_{ik} dx^i dx^k. \quad (2.5)$$

Здесь  $s$  - интервал,  $ds$  - его дифференциал (см. [83]). Компоненты метрического тензора связаны с тензором диффузии соотношениями:

$$g_{ik} = p D_{ik}(\vec{r}), \quad g^{ik} = \frac{1}{p} D^{ik}(\vec{r}). \quad (2.6)$$

Матрица  $D_{ij}(\vec{r})$  является обратной матрице  $D^{ij}(\vec{r})$ , то есть

$$D^{ij}(\vec{r}) D_{jk}(\vec{r}) = \delta_k^i, \quad (2.7)$$

$\delta_k^i$  - единичный тензор.

Сопоставляя уравнение (2.3) с равенствами (2.4), (2.6), приходим к соотношению:

$$g_{ik} u^i u^k = 1, \quad (2.8)$$

с учетом которого и равенства (2.5) получаем выражение для квазиэйконала  $\Gamma_p(\vec{r})$ :

$$\Gamma_p(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} ds = \int_0^{\vec{r}} \sqrt{g_{ik} dx^i dx^k}. \quad (2.9)$$

Интегрирование здесь происходит по траектории концентрационного сигнала, определяемой из вариационного принципа

$$\delta \Gamma_p(\vec{r}) = 0. \quad (2.10)$$

## 2.2 Траектория концентрационного сигнала

Экстремальная кривая – траектория концентрационного сигнала, удовлетворяющая условию (2.10), в терминах криволинейной геометрии называется геодезической и согласно [83] определяется из уравнения

$$\frac{du^i}{ds} + \left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} u^j u^k = 0. \quad (2.11)$$

Здесь символы  $\left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\}$  - символы Кристоффеля (связность эффективной метрики), которые даются равенством:

$$\{^i_{jk}\} = \frac{1}{2} g^{il} (\partial_j g_{kl} + \partial_k g_{jl} - \partial_l g_{kj}). \quad (2.12)$$

Как видно из равенства (2.12), в однородной среде символы Кристоффеля равны нулю. Поэтому согласно (2.11) траектория концентрационного сигнала, как и в случае изотропной диффузии, в однородной среде является прямолинейным отрезком, соединяющим точку наблюдения с источником.

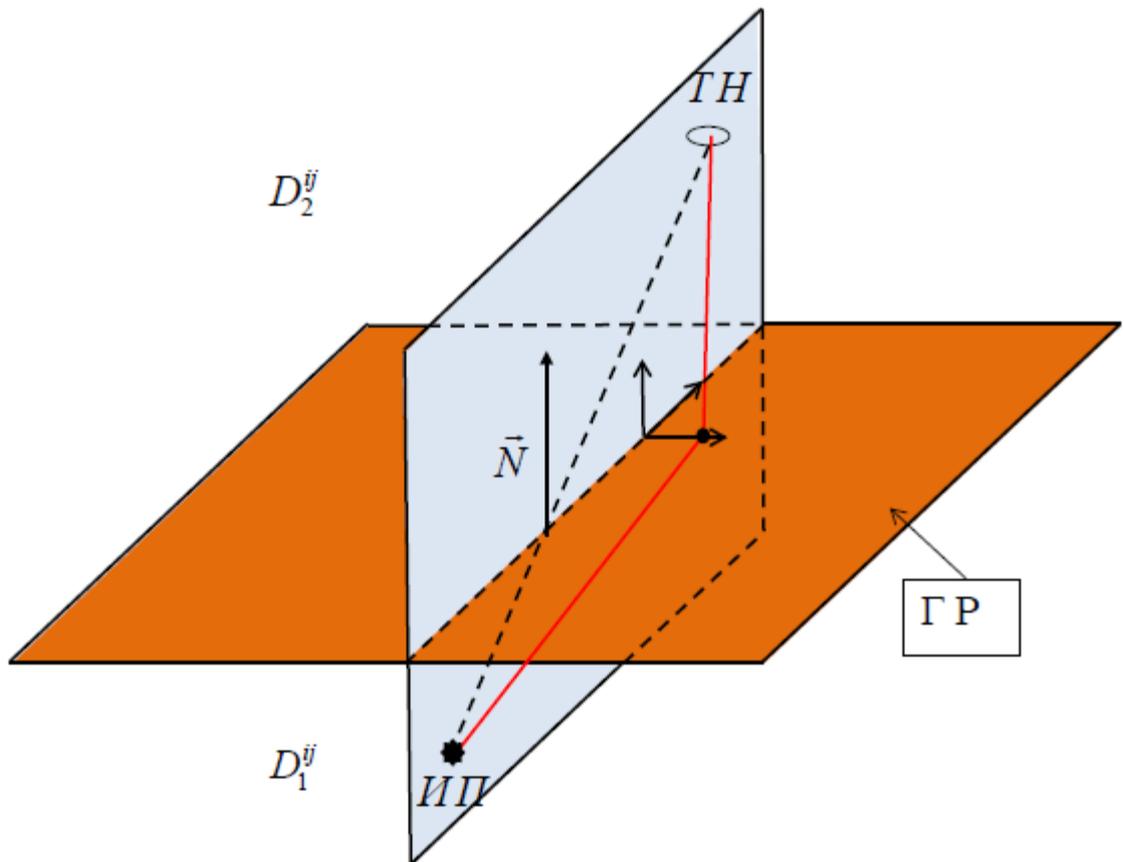


Рис. 2.1. Преломление концентрационного сигнала на границе двух однородных анизотропных сред с коэффициентами диффузии  $D_1^{ij}$  и  $D_2^{ij}$ . ИП - источник, ГН - точка наблюдения, ГР - граница раздела между средами, — - траектория концентрационного сигнала.

В том случае, когда источник примеси и точка наблюдения лежат по разные стороны плоской границы между средами с различающимися тензорами диффузии,

траектория концентрационного сигнала, как и в случае изотропной диффузии, при пересечении границы терпит излом. Реализация закона Снеллиуса в случае анизотропной диффузии отличается от изотропной диффузии в том, что теперь плоскость, содержащая траекторию, не является перпендикулярной к границе между средами (см. Рис. 2.1), потому что дополнительно к нормали к границе выделенными направлениями в этой задаче становятся главные оси тензоров диффузии обеих сред. Исключение составляет случай, когда оба тензора диффузии соответствуют одноосной анизотропии, причем обе оси направлены по нормали к границе. В этом случае траектория концентрационного сигнала, как и для изотропных сред, лежит в плоскости перпендикулярной границе раздела этих сред. Уравнения, описывающие реализацию закона Снеллиуса для анизотропной диффузии, выведены в Приложении 3.

### 2.3 Концентрация

Уравнение для предэкспоненты  $A_p(\vec{r})$  из общего выражения для концентрации (1.4) получается после подстановки этого выражения в уравнение (2.2) в первом порядке по малому параметру  $\xi$  из (1.5):

$$2g^{ik}\partial_i A_p(\vec{r})\partial_k \Gamma_p(\vec{r}) + A_p(\vec{r})\partial_i g^{ik}\partial_k \Gamma_p(\vec{r}) + A_p(\vec{r})g^{ik}\partial_i \partial_k \Gamma_p(\vec{r}) = 0. \quad (2.13)$$

Отсюда с учетом равенств (2.4) находим

$$2\frac{d\ln A_p(r)}{ds} + \partial_i u^i = 0. \quad (2.14)$$

Прежде, чем написать решение уравнения (2.14), выясним поведение второго слагаемого в нем при  $r \ll L$ . На таких масштабах среда практически однородна, и выражение для квазиэйконала согласно (2.9) равно

$$\Gamma_p(\vec{r}) = s \cong \sqrt{g_{ik}x^i x^k}. \quad (2.15)$$

Отсюда с учетом равенств (2.4), (2.6) находим дивергенцию вектора касательной  $u^i$  при  $r \ll L$ :

$$\partial_i u^i \cong \frac{2}{\sqrt{g_{ik}x^i x^k}} \cong \frac{2}{s}. \quad (2.16)$$

Поступая теперь, как при выводе (1.15), (1.16), приходим к решению уравнения (2.14):

$$A_p(\vec{r}) = \frac{B_p}{\int_0^{\vec{r}} \sqrt{D_{ik} dx^i dx^k}} \exp[-H_a(\vec{r})], \quad (2.17)$$

где

$$H_a(\vec{r}) = \frac{1}{2} \int_0^{\vec{r}} ds \left( \partial_i u^i - \frac{2}{s} \right). \quad (2.18)$$

а  $B_p$  - постоянная интегрирования, зависящая от переменной Лапласа. Отметим, что функция  $H_a(\vec{r})$  является независимой от переменной Лапласа. В однородной же среде согласно (2.18) эта функция равна нулю.

Подставляя (2.9) и (2.17) в (1.4), находим выражение для концентрации в представлении Лапласа:

$$c_p(\vec{r}) = \frac{B_p}{\int_0^{\vec{r}} \sqrt{D_{ik} dx^i dx^k}} \exp \left[ -\sqrt{p} \int_0^{\vec{r}} \sqrt{D_{ik} dx^i dx^k} - H_a(\vec{r}) \right]. \quad (2.19)$$

Аналог этого выражения для однородной среды  $\tilde{c}_p(\vec{r})$  получается путем замены  $\int_0^{\vec{r}} \sqrt{D_{ik} dx^i dx^k} \Rightarrow \sqrt{D_{ik} x^i x^k}$  и  $H_a(\vec{r}) \Rightarrow 0$ . С учетом того, что величина  $B_p$  зависит только от переменной Лапласа, концентрация примеси в пространственно-временном представлении в неоднородной среде -  $c(\vec{r}, t)$  получается из выражения для своего аналога для однородной среды  $\tilde{c}(\vec{r}, t)$  посредством операции обратной замены  $\sqrt{D_{ik} x^i x^k} \Rightarrow \int_0^{\vec{r}} \sqrt{D_{ik} dx^i dx^k}$  и восстановления слагаемого  $-H_a(\vec{r})$  в экспоненте. Функция  $\tilde{c}(\vec{r}, t)$  вычислена в приложении П.2 и дается равенством (П.2.3). Произведя указанную операцию над формулой (П.2.3), приходим к асимптотическому выражению для концентрации примеси при анизотропной диффузии в среде, обладающей крупномасштабными неоднородностями:

$$c(\vec{r}, t) = \frac{N}{\sqrt{D_0 (4\pi t)^3}} \exp \left[ -\frac{1}{4t} \left( \int_0^{\vec{r}} \sqrt{D_{ik} dx^i dx^k} \right)^2 - H_a(\vec{r}) \right]. \quad (2.20)$$

Подчеркнем, что интегралы здесь, как и в (2.9), (2.17) и (2.19), берутся вдоль траектории концентрационного сигнала, определяемой уравнением (2.11). Напомним также, что  $D_0 = \det[D^{ik}(0)]$ .

В Приложении 4 показано, что при переходе к случаю, когда тензор диффузии пропорционален единичному  $D^{ik}(\vec{r}) \Rightarrow D(\vec{r})\delta_{ik}$ , асимптотическая формула для концентрации (2.20) переходит в соответствующее выражение для изотропной диффузии – (1.19), отвечающее с размерности  $\delta = 3$ .

## 2.4 Выводы

Подведём основные итоги главы.

Путем применения формализма криволинейной геометрии, заимствованного из общей теории относительности, построена асимптотическая теория классической анизотропной диффузии в среде с крупномасштабными неоднородностями. Как и в случае изотропной диффузии, выражение для концентрации примеси сведено к однократным (линейным) интегралам вдоль траектории концентрационного сигнала, обыкновенное дифференциальное уравнение для которого оказалось уравнением геодезической в криволинейной геометрии.

Анизотропная диффузия может быть обусловлена как анизотропией самого кристалла, в котором происходит перенос примеси, так и структурой среды, если речь идет о геологических формациях. Например, несплошности в геологической среде часто формируются системами трещинами, а сами трещины могут обладать преимущественной ориентацией [84]. Если перенос в геологических средах определяется диффузией примеси в виде раствора в грунтовых водах по системе каналов, сформированных этими трещинами, то возникают выделенные оси, вдоль которых диффузия происходит гораздо быстрее, чем в поперечном к ним направлении.

## ГЛАВА 3

### МОДЕЛЬ ДЫХНЕ С КОЭФФИЦИЕНТАМИ ДИФФУЗИИ, ЗАВИСЯЩИМИ ОТ КООРДИНАТ

В последние годы крайне актуальной задачей является перенос примеси в резко-контрастных средах. В таких средах при их неизменных характеристиках режим переноса может меняться во времени. Простейшим примером таких сред являются регулярно-неоднородные среды, в которых можно выделить области с высокой проницаемостью, ограниченные в одном или двух измерениях, и области с низкой проницаемостью, заполняющие все остальное пространство. Физическим механизмом переноса частиц в обеих областях является классическая диффузия. Такая модель была впервые сформулирована для постоянных в каждой из областей коэффициентов диффузии академиком А.М. Дыхне [85], и была впоследствии названа в его честь [75]. Наряду с классическими режимами переноса примеси, эта модель демонстрирует проявление неклассического режима – субдиффузии. Применительно к геологическим средам хорошо проницаемым областям соответствуют каналы, образованные трещинами, а остальной области - слабопроницаемая матрица.

Практический интерес представляет случай, когда при сохранении сильного различия между коэффициентами диффузии в отдельных областях, внутри каждой из них эти коэффициенты не являются постоянными. Разработке асимптотической теории модели Дыхне с переменными в пространстве коэффициентами диффузии в плоско-параллельной геометрии посвящена настоящая глава.

В разделе 3.1 сформулирована постановка задачи. Раздел 3.2 посвящен вычислению квазиэйконала. В разделе 3.3 получены асимптотические выражения для концентрации примеси в различных пространственно-временных интервалах. В заключительном разделе 3.4 кратко подведены итоги.

#### 3.1 Постановка задачи

Первоначально модель Дыхне была сформулирована следующим образом [85]. Диффузионный перенос примеси происходит в пространстве, состоящем из области *I* (трещины) – плоскопараллельного слоя толщиной  $a$ , заполненного средой с коэффициентом диффузии  $D$ , и области *II* (матрицы) – остальной части бесконечного пространства, заполненной средой с коэффициентом диффузии  $d$  (см. Рис.3.1).

Коэффициенты диффузии удовлетворяют неравенству  $d \ll D$ . В начальный момент времени примесь сосредоточена в одной точке внутри трещины, так что концентрация при  $t = 0$  задана равенством (1.2). Система координат выбрана так, что  $\vec{r} = \{\vec{\rho}, z\}$  - радиус-вектор, где  $\vec{\rho} = (x, y)$  - двумерная координата вдоль границы плоскопараллельного слоя, а ось  $z$  направлена по нормали к трещине. Начало координат выбрано так, что границы между областями **I** и **II** соответствуют равенству  $z = \pm a/2$ . Параметры модели  $a, D, d$  являются константами.

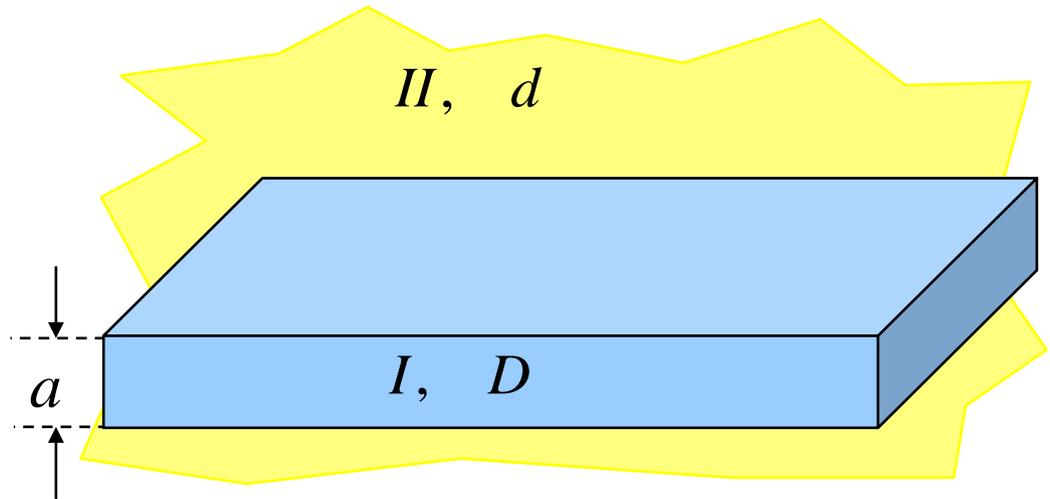


Рис.3.1 Геометрия задачи

Анализ [85] показал, что структура распределения концентрации в существенной мере определяется тремя характерными временами:

$$t_0 = \frac{a^2}{4D}, \quad t_1 = \frac{a^2}{4d}, \quad t_2 = \left(\frac{D}{d}\right)^2 t_1. \quad (3.1)$$

При текущих временах, когда  $t \ll t_0$ , примесь практически полностью сосредоточена в трещине и перенос идет в режиме быстрой трехмерной классической диффузии, так что зависимость характерного размера основной области локализации примеси от времени соответствует оценке  $R(t) \sim \sqrt{Dt}$ . Та же зависимость сохраняется и в интервале времени  $t_0 \ll t \ll t_1$ , но здесь перенос происходит в режиме двумерной классической диффузии, поскольку распределение примеси по толщине трещины уже практически однородно, но доля примеси, проникшей в матрицу, все еще мала. В интервале текущего времени  $t_0 \ll t \ll t_1$  примесь уже большей частью сосредоточена в матрице, но трещина, тем не менее, играет значительную роль в формировании режима

переноса. Здесь он идет в режиме субдиффузии, которой соответствует зависимость  $R(t) \sim \sqrt{D\sqrt{t_1 t}}$ . И только на временах  $t \gg t_2$  перенос полностью определяется матрицей, режим тогда соответствует медленной классической диффузии, так что  $R(t) \sim \sqrt{Dt}$ .

Таким образом, в модели Дыхне происходит смена режимов переноса со временем. Это свойство, как было впервые установлено в работе [86], приводит к тому, что асимптотики концентрации имеют многоступенчатую пространственную структуру. Количество ступеней равно числу режимов переноса, реализовавшихся к текущему моменту времени. Каждая ступень определяется своим режимом переноса, и это происходит так, что, чем более удаленная ступень асимптотики, тем более ранний режим ее определяет, самая близкая ступень определяется текущим режимом переноса, а следующая за нею ступень формируется режимом переноса, свойственным предыдущему интервалу времени.

В постановке задачи настоящей главы коэффициенты диффузии  $D, d$  являются функциями координат, удовлетворяющими прежнему условию  $d \ll D$ . Толщина трещины  $a$  считается постоянной. Уравнение переноса примеси имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} &= \text{div}(\mathcal{D}\nabla c), \\ \mathcal{D}(\vec{r}) &= D(\vec{r})\theta\left(\frac{a}{2} - |z|\right) + d(\vec{r})\theta\left(|z| - \frac{a}{2}\right). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Граничные условия, как обычно, отвечают непрерывности концентрации  $c(\vec{r}, t)$  и нормальной составляющей плотности потока примеси  $-\mathcal{D}(\vec{r}, t)\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial z}$ .

Будем считать, что характерный масштаб  $L$  координатной зависимости, одинаковый для функций обеих  $D(\vec{r})$  и  $d(\vec{r})$  удовлетворяет условию

$$L > \frac{D}{d}a. \quad (3.3)$$

Соответственно, пренебрегая зависимостью коэффициента диффузии в трещине от координаты  $z$ , будем обозначать его  $D(\vec{\rho})$ .

При  $t \ll t_0$ , где  $t_0 = \frac{a^2}{4D(0)}$ , как и в модели с независимыми от координат

параметрами, матрица не влияет на перенос внутри трещины, и он идет в режиме трехмерной классической диффузии с постоянным коэффициентом диффузии  $D(0)$ .

На временах  $t \gg t_0$  распределение примеси при  $|z| < \frac{a}{2}$  по толщине является практически однородным. Поэтому после интегрирования уравнения из (3.2) по толщине трещины и перехода в представление Лапласа, с учетом граничных условий и начального условия (1.2) приходим к уравнению переноса в трещине;

$$p c_p(\bar{\rho}) - \operatorname{div}(D(\bar{\rho}) \nabla c_p(\bar{\rho})) - \frac{1}{a} d(\bar{r}) \frac{\partial c_p(\bar{r})}{\partial z} \Big|_{z=-a/2-0}^{z=a/2+0} = \frac{N}{a} \delta(\bar{\rho}), \quad t \gg t_0. \quad (3.4)$$

В том же представлении уравнение диффузии в матрице имеет вид:

$$p c_p(\bar{r}) = \operatorname{div}(d(\bar{r}) \nabla c_p(\bar{r})), \quad |z| > \frac{a}{2}. \quad (3.5)$$

На асимптотически далеких расстояниях от источника примеси, когда  $r \gg R(t)$ , где  $R(t)$  - размер основной области ее локализации в момент времени  $t$ , решение уравнения (3.4) принимает форму (1.4) с заменой  $\bar{r} \rightarrow \bar{\rho}$ :

$$c_p(\bar{\rho}) = A_p(\bar{\rho}) \exp[-\Gamma_p(\bar{\rho})], \quad \Gamma_p(\bar{\rho}) \gg 1. \quad (3.6)$$

Характер решения системы уравнений (3.4), (3.5) зависит от соотношения между величинами  $|\nabla \Gamma_p(\bar{\rho})|$  и  $\sqrt{\frac{p}{d}}$ . Предположим сначала, что имеет место неравенство

$$|\nabla \Gamma_p(\bar{\rho})| \ll \sqrt{\frac{p}{d}}. \quad (3.7)$$

Тогда благодаря условию непрерывности на границе для концентрации приходим к выводу, что зависимость концентрации примеси в матрице от координаты  $z$  является значительно более быстрой, чем от  $\bar{\rho}$ . Это дает право пренебречь в уравнении (3.5) производными по координатам  $\bar{\rho}$  вдоль границы и тогда оно приобретет вид

$$p c_p(\bar{r}) = d(\bar{\rho}) \frac{\partial^2 c_p(\bar{r})}{\partial z^2}, \quad |z| > \frac{a}{2}. \quad (3.8)$$

Здесь обозначено

$$d(\bar{\rho}) = d(\bar{r}) \Big|_{z=\frac{a}{2}}. \quad (3.9)$$

В уравнении (3.8) и далее считаем, что  $d(\bar{r}) \Big|_{z=\frac{a}{2}} = d(\bar{r}) \Big|_{z=-\frac{a}{2}}$ .

С учетом граничного условия на концентрацию уравнение (3.8) имеет очевидное решение:

$$c_p(\vec{r}) = c_p(\vec{\rho}) \exp \left[ - \left( \left| z \right| - \frac{a}{2} \right) \sqrt{\frac{p}{d(\vec{\rho})}} \right]. \quad (3.10)$$

Подстановка его в (3.4) приводит к замкнутому уравнению для концентрации в трещине:

$$\left( p + \sqrt{\frac{p}{t_1(\vec{\rho})}} \right) c_p(\vec{\rho}) - \operatorname{div}(D(\vec{\rho}) \nabla c_p(\vec{\rho})) = \frac{N}{a} \delta(\vec{\rho}) \quad \text{при } |\nabla_{\Gamma_p}(\vec{\rho})| \ll \sqrt{\frac{p}{d}}. \quad (3.11)$$

Здесь обозначено

$$t_1(\vec{\rho}) = \frac{a^2}{4d(\vec{r})|_{z=\frac{a}{2}}}. \quad (3.12)$$

Рассмотрим теперь случай, когда справедливо неравенство, противоположное (3.7)

$$|\nabla_{\Gamma_p}(\vec{\rho})| \gg \sqrt{\frac{p}{d}}. \quad (3.13)$$

В этом случае зависимость концентрации в матрице от всех координат, включая  $\vec{\rho}$ , становится медленней, чем в трещине. Тогда, с учетом условия непрерывности концентрации на границе, матрица полностью берет на себя формирование режима переноса, и в результате перенос примеси полностью описывается трехмерным уравнением (3.5). При этом концентрация примеси в трещине определяется из граничного условия. Решение уравнения (3.5) в асимптотической области имеет форму (1.4).

### 3.2 Квазиэйконал

В нулевом по малому параметру  $\xi$  (см. (1.5)) после подстановки выражений (3.6) и (1.4), соответственно, в уравнения (3.11) и (3.5) приходим к уравнениям для квазиэйконала:

$$(\nabla_{\Gamma_{1p}}(\vec{\rho}))^2 = \frac{p}{D(\vec{\rho})}, \quad p \gg t_1^{-1}; \quad (3.14)$$

$$(\nabla_{\Gamma_{2p}}(\vec{\rho}))^2 = \frac{\sqrt{\frac{p}{t_1(\vec{\rho})}}}{D(\vec{\rho})}, \quad t_2^{-1} \ll p \ll t_1^{-1}; \quad (3.15)$$

$$(\nabla_{\Gamma_{3p}}(\vec{r}))^2 = \frac{p}{d(\vec{r})}, \quad p \ll t_2^{-1}, \quad (3.16)$$

где характерное время

$$t_2 = \left(\frac{D}{d}\right)^2 t_1 \quad (3.17)$$

получается из сравнения  $|\nabla \Gamma_p(\vec{\rho})| \sim \sqrt{\frac{p}{d}}$ .

Для удобства перейдем от функций  $\Gamma_{sp}$  к их безразмерным аналогам  $\psi_s$ :

$$\Gamma_{mp}(\vec{\rho}) = \kappa_m(p) \psi_m(\vec{\rho}), \quad m = 1, 2; \quad (3.18)$$

$$\Gamma_{3p}(\vec{r}) = \kappa_3(p) \psi_3(\vec{r}), \quad (3.19)$$

где размерные множители  $\kappa_s(p)$  определены равенствами

$$\kappa_1(p) = \sqrt{\frac{p}{D(0)}}, \quad (3.20)$$

$$\kappa_2(p) = \left[ \frac{p}{D^2(0)t_{10}} \right]^{\frac{1}{4}}, \quad (3.21)$$

$$\kappa_3(p) = \sqrt{\frac{p}{d_0}}, \quad (3.22)$$

Здесь  $t_{10} = t_1(0)$ ,  $d_0 = d(\vec{r})|_{\rho=0, z=\frac{a}{2}}$ .

На основе (3.14) – (3.16) с учетом (3.18) – (3.22) приходим к уравнениям для безразмерных функций  $\psi_s$ :

$$(\nabla \psi_s(\vec{\rho}))^2 = n_s^2(\vec{\rho}), \quad s = 1, 2, \quad (3.23)$$

$$(\nabla \psi_3(\vec{r}))^2 = n_3^2(\vec{r}), \quad (3.24)$$

в которых величины  $n_s$  определены равенствами:

$$n_1(\vec{\rho}) = \sqrt{\frac{D(0)}{D(\vec{\rho})}}, \quad (3.25)$$

$$n_2(\vec{\rho}) = n_1(\vec{\rho}) \left[ \frac{t_{10}}{t_1(\vec{\rho})} \right]^{\frac{1}{4}}, \quad (3.26)$$

$$n_3(\vec{r}) = \sqrt{\frac{d_0}{d(\vec{r})}}. \quad (3.27)$$

Поступая так же, как при решении уравнения (1.6) находим решения уравнений (3.23), (3.24):

$$\psi_s(\vec{\rho}) = \int_0^{\vec{\rho}} dl_m n_m(\vec{\rho}), \quad m = 1, 2 \quad (3.28)$$

$$\psi_3(\vec{r}) = \int_0^{\vec{r}} dl_3 n_3(\vec{r}). \quad (3.29)$$

Интегрирование в этих равенствах происходит вдоль траекторий концентрационных сигналов, которые определяются из вариационного принципа:

$$\delta \int_0^{\vec{\rho}} dl n_m(\vec{\rho}) = 0, \quad m = 1, 2; \quad (3.30)$$

$$\delta \int_0^{\vec{r}} dl_3 n_3(\vec{r}) = 0, \quad (3.31)$$

Отсюда аналогично (1.10) вытекают уравнения для единичных векторов, касательных к траекториям -  $\vec{v}_s$ :

$$\frac{d\vec{v}_m}{dl} = \frac{1}{n_m(\vec{\rho})} \left( \nabla n_m(\vec{\rho}) - \vec{v}_m \frac{dn_m(\vec{\rho})}{dl} \right), \quad \vec{v}_m \equiv \vec{v}_m(\vec{\rho}); \quad m = 1, 2 \quad (3.32)$$

$$\frac{d\vec{v}_3}{dl} = \frac{1}{n_3(\vec{r})} \left( \nabla n_3(\vec{r}) - \vec{v}_3 \frac{dn_3(\vec{r})}{dl} \right), \quad \vec{v}_3 \equiv \vec{v}_3(\vec{r}). \quad (3.33)$$

Отметим, что траектории при  $s = 1, 2$  являются плоскими, а траектория с  $s = 3$  - вообще говоря, объемная. Функции  $n_s$  могут быть названы индексами концентрационной рефракции, а величины  $\psi_m(\vec{\rho})$  и  $\psi_3(\vec{r})$  - длинами концентрационных путей.

### 3.3. Концентрация примеси в асимптотическом пределе

В первом приближении по малому параметру  $\xi$  из уравнений (3.11) и (3.5) после подстановки в них выражений (3.6) и (1.4) соответственно, получаются уравнения для предэкспонент:

$$\frac{d}{d\psi_m} \left[ \ln \left( A_{mp} \frac{n_m}{n_1} \right) \right] + \frac{1}{2} \operatorname{div} \left( \frac{\vec{v}_m}{n_m} \right) = 0, \quad d\psi_m = n_m dl_m; \quad m = 1, 2. \quad (3.34)$$

$$\frac{d}{d\psi_3} \left[ \ln(A_{3p}) \right] + \frac{1}{2} \operatorname{div} \left( \frac{\vec{v}_3}{n_3} \right) = 0, \quad d\psi_3 = n_3 dl_3. \quad (3.35)$$

Напомним, что величины, отмеченные значком  $m=1,2$ , зависят от двумерной координаты  $\vec{\rho}$ , а со значком 3 - являются функциями трехмерной координаты  $\vec{r}$ . Решения уравнений (3.34) и (3.35), удовлетворяющих условию сшивки с точными решениями для однородной среды

$$c_{mp}^{(0)}(\vec{\rho}) = \frac{N}{a\sqrt{8\pi\kappa_m\rho}} \exp(-\kappa_m\rho), \quad m=1,2; \quad (3.36)$$

$$c_{3p}^{(0)}(\vec{r}) = \frac{N}{4\pi d_0 r} \exp(-\kappa_3 r). \quad (3.37)$$

ИМЕЮТ ВИД:

$$A_{mp}(\vec{\rho}) = \frac{Nn_1(\vec{\rho}) \exp[-H_m(\vec{\rho})]}{aD(0)n_m(\vec{\rho})\sqrt{8\pi\kappa_m(\vec{\rho})\psi_m(\vec{\rho})}}, \quad (3.38)$$

$$H_m(\vec{\rho}) = \frac{1}{2} \int_0^{\vec{\rho}} d\psi_m \left[ \operatorname{div} \left( \frac{\vec{v}_m}{n_m} \right) - \frac{1}{\psi_m} \right]; \quad m=1,2.$$

$$A_{3p}(\vec{r}) = \frac{Nn_3(\vec{r})}{4\pi d(0)\psi_3(\vec{r})} \exp[-H_3(\vec{r})], \quad (3.39)$$

$$H_3(\vec{r}) = \frac{1}{2} \int_0^{\vec{r}} d\psi_3 \left[ \operatorname{div} \left( \frac{\vec{v}_3}{n_3} \right) - \frac{2}{\psi_3} \right].$$

Концентрации в пространственно-временном представлении  $c(\vec{\rho},t)$  и  $c(\vec{r},t)$  получаются путем применения операции обратного преобразования Лапласа к общему выражению (1.4):

$$c(t) = \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} A_p \exp[-\Gamma_p + pt], \quad \operatorname{Re} b > 0. \quad (3.40)$$

Благодаря условию  $\Gamma_p \gg 1$ , интеграл здесь берется с помощью метода стационарной фазы:

$$c(t) = \frac{A_{p_0}}{\sqrt{2\pi \left| \frac{\partial^2 \Gamma_p}{\partial p^2} \right|_{p=p_0}}} \exp[-\Gamma_{p_0} + p_0 t] \quad (3.41)$$

Стационарная точка  $p_0$  (она есть функция координат и времени) находится из уравнения.

$$\left. \frac{\partial \Gamma_p}{\partial p} \right|_{p=p_0} = t. \quad (3.42)$$

После подстановки равенств (3.18) – (3.22) и (3.38), (3.39) в уравнение (3.42) и равенство (3.41) приходим к асимптотическим выражениям для концентрации примеси в модели Дыхне с параметрами, зависящими от координат:

$$c(\vec{\rho}, t) \cong \frac{N}{4\pi a D(0)t} \exp \left\{ -\frac{(\psi_1(\vec{\rho}))^2}{4D_0 t} - H_1(\vec{\rho}) \right\}, \quad (3.1)$$

$$\frac{(\psi_1(\vec{\rho}))^2}{4D_0 t} \gg \frac{t}{t_1}, 1.$$

$$c(\vec{\rho}, t) \cong \frac{N}{2\pi a D(0)t\sqrt{6}} \exp \left\{ -3 \left( \frac{\psi_2(\vec{\rho})}{4\sqrt{D(0)\sqrt{t_1(0)}t}} \right)^{4/3} - H_2(\vec{\rho}) \right\}, \quad (3.2)$$

$$\frac{t}{t_2}, 1 \ll \left( \frac{\psi_2(\vec{\rho})}{4\sqrt{D_0\sqrt{t_1(0)}t}} \right)^{4/3} \ll \frac{t}{t_1}.$$

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N}{(4\pi d_0 t)^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{\psi_3^2(\vec{r})}{4d_0 t} - H_3(\vec{r}) \right\}, \quad (3.3)$$

$$1 \ll \frac{\psi_3^2(\vec{r})}{4d_0 t} \ll \frac{t}{t_2}.$$

Указанные в этих равенствах пространственно-временные интервалы отвечают интервалам из (3.14) – (3.16) для переменной Лапласа, в которые попадает определенная уравнением (3.42) стационарная точка  $p_0$ , являющаяся функцией координат и времени.

### 3.4 Выводы

Сформулируем основные результаты главы.

На основе асимптотического подхода получены выражения для концентрации примеси в модели Дыхне с переменными в пространстве параметрами – простейшей физической модели, демонстрирующей неклассическое (субдиффузионное) поведение переноса и смену транспортных режимов во времени.

Экспоненциальное убывание концентрационных асимптотик позволило для квазиэikonала получить дифференциальные уравнения в частных производных первого порядка. Поэтому в предельных временных интервалах асимптотические выражения сведены к однократным интегралам вдоль траекторий концентрационных сигналов, которые определяются из вариационного принципа – аналога принципа Ферма в геометрической оптике. Интегралы вдоль траекторий являются аналогами длины оптического пути, а соответствующие им подынтегральные выражения – аналогами индекса рефракции. Основное отличие в результатах модели с пространственно зависимыми параметрами от модели Дыхне с постоянными параметрами сводится к замене расстояний от источника примеси до точки наблюдения на соответствующие им длины концентрационного пути – интегралы вдоль траектории концентрационных сигналов от индексов рефракции.

## ГЛАВА 4

### ПЕРЕНОС ПРИМЕСИ В ТРЕЩИНОВАТО-ПОРИСТОЙ СРЕДЕ С СОРБИРУЮЩИМИ ВКЛЮЧЕНИЯМИ

В предыдущих главах рассматривался перенос в средах с крупномасштабными неоднородностями, когда на протяжении исследуемого временного интервала размер облака примеси меньше, либо сравнимы с масштабом неоднородностей, так что нельзя ввести усредненные свойства среды. Но и в том случае, когда размеры облака превосходят пространственные размеры неоднородностей, для резко контрастных сред их свойства не могут быть усреднены, поскольку характер переноса во многом определяется градиентами концентрации примеси, сохраняющимися долгое время на масштабах отдельных неоднородностей среды.

Речь идет о так называемых двупористых средах. В них среда миграции представляется в виде суммы двух подсистем, обладающих сильно различающимися характеристиками, - сильно проницаемой и слабопроницаемой подсистем. Сильно проницаемая подсистема обычно формируется сетью каналов, образованных крупными порами или трещинами, и в связи с этим такие среды часто называют трещиновато-пористыми. Перенос примеси по ним происходит за счет адвекции в поле скоростей фильтрующейся жидкости и молекулярной диффузии в растворе. Слабопроницаемая подсистема обычно представляет собой ансамбль пористых блоков (с очень низкой проницаемостью), заполняющих пространство между каналами. В блоках, в силу их низкой проницаемости, адвекцией можно пренебречь, и перенос определяется только молекулярной диффузией. Между подсистемами происходит обмен примесью, в существенной мере влияющий на формирование режимов переноса. Имеющиеся в литературе работы по моделированию переноса в двупористых средах описаны в Историческом обзоре диссертации.

В этой Главе будет рассмотрено влияние неоднородности такого важного фактора как сорбция. Рассматривается трещиновато-пористая среда, в которой часть пористых блоков обладает способностью адсорбировать примесь (будем называть их сорбирующими включениями). Особый интерес представляет случай, когда их объемная доля мала, но сорбционная емкость велика. Будем полагать, что эти блоки из-за их низкой проницаемости не изменяют структуру течения грунтовых вод, поэтому адвекция примесей по-прежнему происходит по системе трещин, в то время как в пористых блоках обоих типов (нормальных и адсорбционных) имеет место только диффузия.

Целью данной Главы является построение модели переноса примеси в трещиновато-пористой среде, содержащей редкие сорбирующие включения.

Далее в разделе 4.1 формулируется постановка задачи. В разделе 4.2 анализируются режимы переноса. В разделе 4.3 рассматривается поведение концентрации примеси на асимптотически больших расстояниях от источника примеси. В заключительном разделе кратко подводятся итоги Главы.

#### 4.1 Постановка задачи

Представим трещиновато-пористую среду с редкими адсорбирующими включениями как совокупность трех подсистем (см. Рис. 4.1): 1) система каналов с высокой проницаемостью, образованных трещинами (или связанными крупными порами), 2) подсистема слабопроницаемых несорбирующих пористых блоков и 3) подсистема слабопроницаемых пористых блоков, которые могут сильно адсорбировать растворенную в воде примесь. Свойства среды будем характеризовать следующими параметрами:  $\varphi_{fr}$  - трещиноватость среды;  $V_j$  и  $S_j$  - характерный объем и площадь поверхности блоков и включений, где индекс  $j=1$  обозначает обычные блоки, а  $j=2$  - сорбирующие включения;  $\Psi_j$  - объемная доля, занимаемая блоками каждого типа,  $\varphi_j$  - их пористость. Для описания диффузии примеси в блоках первого типа введем эффективный коэффициент диффузии  $d$ , который определяется молекулярной диффузией в растворе, насыщающем блоки, и учитывает извилистость каналов, образованных пористостью. Свойства сорбирующих включений будем характеризовать равновесным коэффициентом сорбции  $k_D$ , который связывает концентрацию, адсорбированную на поверхности пор (в пересчете на единицу объема среды) и концентрацию в растворе внутри пор (см. [87]).

Наибольший интерес представляет случай, когда объёмная доля, заполненная сорбирующими включениями, мала

$$\Psi_2 \ll \Psi_1, \quad \Psi_1 \approx 1, \quad (4.1)$$

но доля примеси, которую могут накапливать включения (их «емкость») велика

$$\Psi_2 \varphi_2 K \gg \Psi_1 \varphi_1, \quad (4.2)$$

где  $K = k_D + 1$  есть величина, названная коэффициентом задержки (см. [87]).

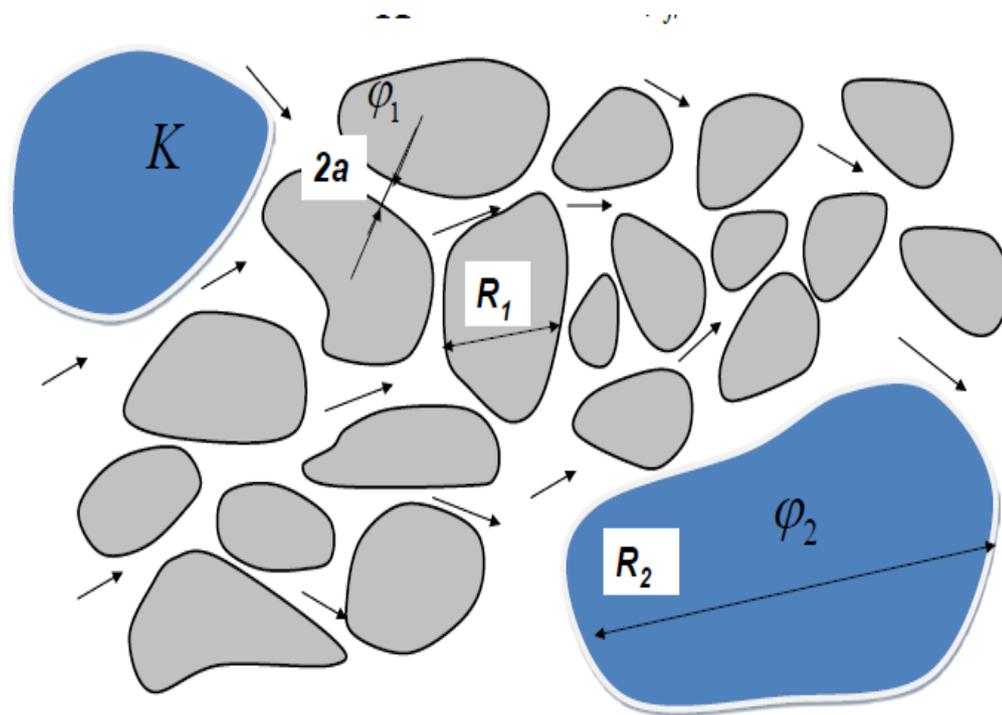


Рис.4.1 Схематичное изображение статистически-однородной трещиновато-пористой среды с сорбирующими включениями.  $R_j$  - характерный размер блоков типа  $j$ ,

$$R_j \sim V_j/S_j, \quad 2a \text{ -характерный размер трещин.}$$

Для того, чтобы охарактеризовать «емкость» сорбирующих включений, рассмотрим распределение примеси, которое устанавливается при достижении равновесия между примесью, локализованной в трещинах и в блоках обоих типов (что справедливо при больших временах, см. ниже). В этом случае количество примеси, содержащейся в блоках на единицу объема среды, определяется примесью, содержащейся в растворе внутри порового пространства, и, соответственно, пропорционально  $\Psi_1\varphi_1$  (для  $j=1$ ). Доля примеси, содержащаяся во включениях ( $j=2$ ), определяется суммой растворенной и адсорбированной примеси, и, следовательно, пропорциональна  $\Psi_2\varphi_2K$ . Заметим, что во включениях локальное равновесие между примесью в растворенном веществе внутри пор и адсорбированной на поверхности пор достигается очень быстро из-за очень малого размера пор.

Уравнение переноса примеси в растворе внутри трещин (активной примеси) имеет вид

$$\frac{\partial \hat{c}}{\partial t} + \text{div}(\vec{V}\hat{c} - d_m \nabla \hat{c}) = 0, \quad (4.3)$$

где  $\hat{c}(\vec{r}, t)$  - концентрация растворенной примеси внутри трещин,  $\vec{V}$  - локальная скорость адвекции в трещинах,  $d_m$  - коэффициент молекулярной диффузии примеси в растворе. Примесь может уходить из трещин в блоки (и во включения), так что для концентрации примеси в растворе на границе раздела между трещинами и блоками выполняются следующие условия

$$\hat{c}|_{\text{Interface}} = \hat{n}|_{\text{Interface}}, \quad (4.4)$$

где  $\hat{n}$  - концентрация примеси в растворе внутри пор в блоках. Также на данной границе должно выполняться условие непрерывности для нормальной компоненты плотности потока примеси ( $i_n$  в трещинах и  $q_n$  в блоках)

$$i_n|_{\text{Interface}} = q_n|_{\text{Interface}}, \quad (4.5)$$

После пространственного усреднения уравнения (4.3) на масштабах, превышающих характерные размеры блоков и расстояния между включениями, получаем по аналогии с [88] уравнение для усредненной концентрации активной примеси

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \text{div}(\bar{u}c - D\nabla c) = -Q_1 - Q_2, \quad (4.6)$$

где

$$c(\vec{r}, t) = \frac{1}{V_\Sigma} \int_{V_\Sigma} d^3 r' \hat{c}(\vec{r} + \vec{r}', t) - \quad (4.7)$$

усредненная концентрация примеси в трещинах,  $V_\Sigma$  - объем усреднения. В формуле (4.6)  $\bar{u}$  - средняя скорость адвекции, которую мы считаем постоянной,  $D$  - коэффициент дисперсии, который включает молекулярную диффузию и гидродинамическую дисперсию [88]. Для оценок можно принять:  $D \sim d_m$  при  $Pe \leq 1$  и  $D \sim d_m \cdot Pe$  при  $Pe \gg 1$ , где число

Пекле определяется как  $Pe = \frac{Ru}{d_m}$ ,  $R \sim \max_{j=1,2} \frac{V_j}{S_j}$ .

В общем случае в формуле (4.6) следовало бы ввести коэффициент задержки  $\tilde{K}$  (множитель перед производной  $\frac{\partial c}{\partial t}$ ), который учитывает адсорбцию примесей на поверхности трещин, контактирующих с сорбирующими включениями. Этот коэффициент пропорционален двум факторам:

1) относительной доле примеси, сорбируемой на поверхности трещин по отношению к количеству примеси в растворе в объеме трещин, что можно оценить как отношение межатомного расстояния к апертуре трещин;

2) доле площади поверхностей сорбирующих включений к общей площади поверхности трещин (или, что то же самое, доле сорбирующих включений).

Первый фактор мал, поскольку мы полагаем, что велика апертура трещин. Второй фактор также мал в силу условия  $\Psi_2 \ll 1$ . Поэтому ниже мы пренебрегаем этим эффектом, и считаем  $\tilde{K} \cong 1$ .

Фигурирующие в правой части (4.6) плотности стоков  $Q_{1,2}$  описывают обмен примеси между трещинами и блоками первого и второго типов, соответственно. Плотность стоков на единицу объема согласно [70] в общем виде можно представить как

$$Q_j = \frac{\partial}{\partial t} \int_0^t \Theta_j(t-t') c(t') dt', \quad j = 1, 2, \quad (4.8)$$

где свойства ядра интегрального оператора  $\Theta_j(t)$  определяются диффузией примеси в блоки и будут описаны ниже.

Рассматривается задача с начальным условием

$$c(\vec{r}, 0) = N \delta(\vec{r}). \quad (4.9)$$

Полагаем, что при  $t = 0$  вся примесь расположена в трещинах.

Далее в уравнении (4.6) удобно перейти в представлении Фурье-Лапласа. Тогда имеем:

$$\left( p + i(\vec{u}\vec{k}) + Dk^2 \right) c_{p,\vec{k}} = N_0 - Q_{p,\vec{k};1} - Q_{p,\vec{k};2}, \quad (4.10)$$

где  $p$  - переменная Лапласа,  $\vec{k}$  - волновой вектор,  $c_{p,\vec{k}}$   $Q_{p,\vec{k};j}$  - образы Фурье-Лапласа концентрации примеси в трещинах и плотности стока примеси, соответственно. В силу (4.8), выражения для стоков могут быть представлены в виде

$$Q_{p,\vec{k};j} = \Lambda_j(p) c_{p,\vec{k}}. \quad (4.11)$$

Здесь функция  $\Lambda_j(p) = p \Theta_j(p)$  обычно носит название «функции памяти». Она зависит от формы блоков, и рассчитать ее в общем виде не представляется возможности. Но для нее можно получить асимптотические выражения в пределе больших и малых значений переменной Лапласа. Для этого решается следующая задача.

Для концентрации в обычных блоках  $n_1$ , усредненной по масштабам больше, чем характерные размеры пор в блоках, но много меньших, чем размер самого блока, уравнение имеет вид

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = d \Delta n_1, \quad (4.12)$$

где  $d$  - эффективный коэффициент диффузии, учитывающий пористость и извилистость путей миграции примеси внутри блоков.

Для концентрации в сорбирующих блоках необходимо учесть обмен между примесью в растворе внутри пор и примесью, адсорбированной на поверхности пор:

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = d \Delta n_2 - \frac{1}{t_0} (k_D n_2 - n_{ad}), \quad (4.13)$$

где  $n_2$  - концентрация в растворе внутри пор,  $n_{ad}$  - концентрация, адсорбированная на поверхности пор, а  $t_0 = \frac{\rho^2}{4d_m}$  - характерное время диффузии на масштабе порядка размера  $\rho$  пор. Для адсорбированной концентрации справедливо уравнение

$$\frac{\partial n_{ad}}{\partial t} = \frac{1}{t_0} (k_D n_2 - n_{ad}). \quad (4.14)$$

Складывая (4.13) и (4.14), получаем

$$\frac{\partial}{\partial t} (n_2 + n_{ad}) = d \Delta n_2, \quad (4.15)$$

а учитывая, что время установления равновесия  $t_0$  мало, в (4.15) можно положить  $n_{ad} \cong k_D n_2$ , так что вместо (4.15) имеем

$$(1 + k_D) \frac{\partial n_2}{\partial t} = d \Delta n_2 \quad (4.16)$$

или, окончательно,

$$\frac{\partial n_2}{\partial t} = \frac{d}{K} \Delta n_2, \quad (4.17)$$

где  $K$  - введённый выше коэффициент задержки.

Условие для концентрации примеси на границе блока с трещиной следует из (4.4), где надо учесть, что усредненные концентрации связаны с концентрациями в поровом пространстве как  $c = \hat{c} \varphi_{fr}$  и  $n_j \cong \hat{n} \varphi_j$ :

$$n_j|_{bound} = \varphi_j / \varphi_{fr} \cdot c. \quad (4.18)$$

Поток примеси из области трещин на один блок типа  $j$  определяется выражением

$$q_{nj} = -d_j \oint_{S_j} \nabla n_j d\vec{S}_j, \quad (4.19)$$

где интегрирование осуществляется на поверхности  $j$ - блока,  $d_1 = d$  и  $d_2 = d/K$ . Для того, чтобы получить выражение для плотности стоков  $Q_j$ , необходимо поток на один блок (4.19) умножить на плотность блоков в единице объема, которая с учетом того, что  $\varphi_{fr} \ll 1$  можно определить как

$$\rho_j = \Psi_j / V_j. \quad (4.20)$$

В работе [70] для трещиновато-пористой среды без сорбирующих включений показано, что выражение  $\Lambda_j(p)$  имеет универсальный вид при больших  $p$  (что соответствует малым временам, когда частицы примеси в блоках локализованы в достаточно узком поверхностном слое) и малых  $p$  (большие времена, когда частицы заполняют пространство блока почти однородно). Для трещиновато-пористой среды с включениями функция  $\Lambda_j(p)$  для разных значений переменной Лапласа представима в следующем виде

$$\Lambda_j(p) \approx \begin{cases} \sqrt{\frac{p}{t_{aj}}}, & pt_{bj} \gg 1 \\ p \sqrt{\frac{t_{bj}}{t_{aj}}}, & pt_{bj} \ll 1 \end{cases} \quad (4.21)$$

где  $t_{aj}$  и  $t_{bj}$  выражаются через параметры среды, как и в работе [74], следующим образом

$$t_{a1} = \frac{R_1^2}{\Psi_1^2 (\varphi_1 / \varphi_{fr})^2 d}, \quad (4.22)$$

$$t_{b1} = \frac{R_1^2}{d}, \quad (4.23)$$

$$t_{a2} = \frac{R_2^2}{\Psi_2^2 (\varphi_2 / \varphi_{fr})^2 dK}, \quad (4.24)$$

$$t_{b2} = \frac{R_2^2}{d} K. \quad (4.25)$$

Отсюда с учетом неравенства (4.2) вытекает соотношение

$$\frac{t_{b2}}{t_{a2}} \gg \frac{t_{b1}}{t_{a1}}. \quad (4.26)$$

Заметим, что выражения (4.21) согласуются с выражениями для «функции памяти» для блоков в форме пластины и сферических блоков (рассчитанных в работах [66] и [67]) и совпадают с их асимптотиками в малых и больших величинах  $p$ .

Физический смысл времени  $t_{bj}$  состоит в том, что на временах больше  $t_{bj}$  концентрация примеси внутри блока сорта  $j$  становится почти однородной. Действительно, оценивая размер блоков как  $R_j \sim \frac{V_j}{S_j}$ , то для  $j=1$  получим  $t_{b1} \sim \frac{R_1^2}{d}$ , что есть время диффузии примеси на расстояние порядка размера блока. Для блоков второго типа имеем  $t_{b2} \sim \frac{R_2^2}{d} K$ , где учитывается эффективное уменьшение коэффициента диффузии за счет сорбции.

Физический смысл времени  $t_{aj}$  состоит в том, что на временах  $t \sim t_{aj}$  количество примеси в блоках сорта  $j$  и в каналах сравниваются по порядку величины. Действительно, количество примеси в трещинах в заданном объеме  $V_0$  приблизительно равно  $N_{fr} \approx \hat{c}\varphi_{fr}V_0$ . В том же объеме  $V_0$  количество примеси в блоках первого типа определяется как  $N_1 \approx \hat{n}_1\varphi_1\delta V_1\rho_1$ . Здесь  $\hat{n}_1$  микроскопическая концентрация растворенной примеси в порах внутри блоков, а  $\delta V_1$  - это часть объема блоков, в которой сосредоточена эта примесь. Величину  $\delta V_1$  на временах  $t_{a1}$  можно оценить как  $\delta V_1 \approx S_1\sqrt{dt_{a1}}$ . Сравнивая  $N_1$  и  $N_{fr}$ , учитывая условие (4.4) и определение  $\rho_j$  (4.20), получаем выражение для  $t_{a1}$ . Если оценить (с учетом того, что  $\Psi_1 \approx 1$ ) трещиноватость как  $\varphi_{fr} \sim a/R_1 \sim aS_1/V_1$ , где  $a$  - характерная апертура раскрытия трещин, то для  $t_{a1}$  получим выражение  $t_{a1} \approx a^2/d\varphi_1^2$ .

Аналогично, можно определить физический смысл характерного времени  $t_{a2}$ . Здесь, учитывая сорбцию примеси в блоках с  $j=2$ , получим, что  $N_2 \approx \hat{n}_2\varphi_2K\delta V_2\rho_2$ , где  $\delta V_2 \sim S_2\sqrt{dt_{a2}/K}$ . Приравняв величины  $N_2$  and  $N_{fr}$ , находим характерное время  $t_{a2}$ , которое определяет, когда блоки второго типа начинают заметно влиять на перенос примеси. Данное время можно также представить в виде  $t_{a2} \sim \frac{a^2}{\Psi_2^2 d K \varphi_2^2} \cdot (R_2/R_1)^2$ .

Отсюда следует, что при  $\Psi_2 \ll 1$  и  $R_2 \gg R_1$  (редкие и крупные включения) выполняется условие  $t_{a2} \gg a^2 / dK\varphi_2^2$ .

## 4.2 Режимы переноса

Охарактеризуем режимы переноса следующими величинами:  $N(t)$  - количество частиц примеси в трещинах (активной примеси),  $X(t)$  - среднее смещение активной примеси и  $\sigma_\alpha(t)$ ,  $\alpha = \parallel, \perp$  - дисперсия активной примеси в продольном и поперечном относительно скорости адвекции направлениях:

$$\begin{aligned} N(t) &= \int d^3 r c(\vec{r}, t), \\ X(t) &= N^{-1}(t) \int d^3 r r_{\parallel} c(\vec{r}, t), \\ \sigma_\alpha^2(t) &= N^{-1}(t) \int d^3 r r_\alpha^2 c(\vec{r}, t) - X^2(t) \delta_{\alpha\parallel}. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Здесь знаки  $\alpha = \parallel$  и  $\perp$  - обозначают компоненты вдоль и поперёк скорости адвекции, соответственно.

После перехода в равенствах (4.27) в представление Фурье-Лапласа, получим

$$\begin{aligned} N(t) &= \int \frac{dp}{2\pi i} \left( c_{p, \vec{k}} \right) \Big|_{\vec{k}=0} e^{pt}, \\ X(t) &= \frac{i}{N(t)} \int \frac{dp}{2\pi i} e^{pt} \frac{\partial}{\partial k_{\parallel}} \left( \bar{c}_{p, \vec{k}} \right) \Big|_{k=0}, \\ \sigma_\alpha^2(t) &= -\frac{1}{N(t)} \int \frac{dp}{2\pi i} e^{pt} \frac{\partial^2}{\partial k_\alpha^2} \left( \bar{c}_{p, \vec{k}} \right) \Big|_{k=0} - X^2(t) \delta_{\alpha\parallel}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

где  $c_{p, \vec{k}}$  в соответствии с (4.10) и (4.11) имеет вид

$$c_{p, \vec{k}} = N_0 \left( p + \Lambda_1(p) + \Lambda_2(p) + i(\vec{u}\vec{k}) + Dk^2 \right)^{-1}. \quad (4.29)$$

Подставляя (4.29) в (4.28), получим, что характеристики режимов переноса определяются следующими выражениями

$$\begin{aligned} N(t) &= N_0 \int_{l-i\infty}^{l+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} e^{pt} \frac{1}{\Omega(p)}, \\ X(t) &= \frac{N_0}{N(t)} \int_{l-i\infty}^{l+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} e^{pt} \frac{u}{\Omega(p)^2}, \\ \sigma_\alpha^2(t) &= \frac{N_0}{N(t)} \int_{l-i\infty}^{l+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} e^{pt} \frac{2(D\Omega(p) + u_\alpha^2)}{\Omega(p)^3} - X^2(t) \delta_{\alpha\parallel} \end{aligned} \quad (4.30)$$

где

$$\Omega(p) = p + \Lambda_1(p) + \Lambda_2(p). \quad (4.31)$$

В зависимости от соотношения между характерными временами (4.22) - (4.25) возникает последовательность интервалов текущего времени со свойствами каждому из них режимами переноса. Во всех случаях предполагаем выполненным условие

$$t_u \lesssim \min(t_{1a}, t_{2a}), \quad t_u = \frac{4D}{u^2} \quad (4.32)$$

Учитывая также неравенство (4.26), проанализируем режимы переноса в каждом из возникающих временных интервалов.

**I.**  $t_{a1} \ll t_{a2}$

1.  $t \ll t_{a1}$ .

Для таких времен значения переменной Лапласа соответствуют  $p \gg t_{a1}^{-1}$ , и выражение (4.30) аппроксимируется как  $\Omega(p) \cong p$ . Подстановка этого выражения в (4.30) с последующим проведением обратного преобразования Лапласа дает:

$$\begin{aligned} N(t) &\cong N_0, \\ X(t) &\cong ut, \\ \sigma_{\parallel}(t) &\cong \sqrt{2Dt}, \quad \sigma_{\perp}(t) \cong 2\sqrt{Dt}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Выражения для величин  $N(t)$ ,  $X(t)$  и  $\sigma_{\perp}(t)$  здесь остаются справедливыми во всем интервале  $t \ll t_{a1}$ . Результат же для продольной дисперсии  $\sigma_{\parallel}(t)$  требует выполнения дополнительного условия:  $t \ll (t_{a1}t_u^2)^{\frac{1}{3}}$ . В том случае, когда  $t_u \ll t_{a1}$ , возникает дополнительный интервал времени -  $(t_{a1}t_u^2)^{\frac{1}{3}} \ll t \ll t_{a1}$ , в котором в формуле для продольной дисперсии  $\sigma_{\parallel}(t)$  из (4.30) в подынтегральном выражении в соответствии с (4.31) и (4.21) требуется положить  $\Omega(p) \cong p + \sqrt{\frac{p}{t_{a1}}}$ , и тогда приходим к формуле

$$\sigma_{\parallel}(t) \cong \frac{4}{\sqrt{5}} ut \left( \frac{t}{\pi t_{a1}} \right)^{\frac{1}{4}} \quad \text{при} \quad (t_{a1}t_u^2)^{\frac{1}{3}} \ll t \ll t_{a1}. \quad (4.34)$$

Такое поведение дисперсии связано с тем, что при сносе облака примеси со скоростью  $\bar{u}$  часть примеси, осажденная ранее в пористых блоках, возвращается затем

обратно в трещины. В указанном интервале эта доля составляет  $\frac{\delta N}{N_0} \cong \sqrt{\frac{t}{t_{a1}}}$ , и эти частицы примеси распределены в пространственном интервале от 0 до  $ut$  приблизительно равномерно. В итоге приходим к формуле (4.34). Временной интервал, указанный в (4.34), возникает при выполнении условия  $Pe \gg \left(\frac{R_1}{a}\right)^2$ .

Заметим, что, несмотря на то, что дисперсия растет по степенному закону с показателем больше  $1/2$ , этот режим не является супердиффузионным, так как выражение (4.34) удовлетворяет условию  $\sqrt{2Dt} \ll \sigma_{\parallel}(t) \ll ut$ . Данный режим можно назвать режимом адвекции-диффузии с сильно-анизотропным профилем концентрации: впереди максимума имеет место обычное гауссово убывание, а позади него – концентрация убывает по степенному закону. Впервые данный режим был описан в работе [90]. В целом же перенос примеси при  $t \ll t_{a1}$  соответствует режиму, близкому к быстрой адвекции-диффузии.

$$2. t_{a1} \ll t \ll t_{b1}.$$

На этих временах влияние блоков (основной вклад определяется блоками первого типа) становится сопоставимым с адвекцией. Значения переменной Лапласа находятся в интервале  $t_{b1}^{-1} \ll p \ll t_{a1}^{-1}$ , а в знаменателях подынтегральных выражений в (4.30)

величина  $\Omega(p) \cong \sqrt{\frac{p}{t_{a1}}}$ . После выполнения обратного преобразования Лапласа в (4.30)

получаем выражения для характеристик режима переноса

$$\begin{aligned} N(t) &\cong N_0 \sqrt{\frac{t_{a1}}{\pi t}}, \\ X(t) &\cong \sqrt{\pi D_{u1} t}, \\ \sigma_{\parallel}(t) &\cong \sqrt{(4 - \pi) D_{u1} t}, \\ \sigma_{\perp}(t) &\cong 2\sqrt{D\sqrt{\pi t_{a1} t}}. \end{aligned} \tag{4.35}$$

Здесь

$$D_{u1} = u^2 t_{a1} \tag{4.36}$$

Таким образом, в этом временном интервале реализуются в продольном направлении режим квазидиффузии, впервые установленным в работе [91], а в поперечном – субдиффузия при  $\sigma_{\perp}(t) \propto t^{\frac{1}{4}}$ .

$$3. t_{b1} \ll t \ll t_*, \quad t_* = t_{b1} \frac{t_{a2}}{t_{a1}}$$

На этих временах блоки первого типа уже насыщены примесью, а вклад сорбирующих включений еще несуществен. Значения переменной Лапласа находятся в интервале  $t_*^{-1} \ll p \ll t_{b1}^{-1}$ . Поэтому в соответствии с равенствами (4.31) и (4.21) имеем. Подстановка этого выражения в (4.30) с последующим обратным преобразованием Лапласа дает:

$$\begin{aligned} N(t) &\cong N_1, \\ X(t) &\cong u_1 t, \\ \sigma_{\parallel}(t) &\cong \sqrt{2D_1 t}, \\ \sigma_{\perp}(t) &\cong 2\sqrt{D_1 t}. \end{aligned} \tag{4.37}$$

Здесь обозначено:

$$N_1 = N \sqrt{\frac{t_{a1}}{t_{b1}}}, \quad \bar{u}_1 = \bar{u} \sqrt{\frac{t_{a1}}{t_{b1}}}, \quad D_1 = D \sqrt{\frac{t_{a1}}{t_{b1}}}. \tag{4.38}$$

Учитывая неравенство  $\sqrt{\frac{t_{a1}}{t_{b1}}} \ll 1$ , здесь реализуется замедленный режим классической диффузии - адвекции.

$$4. t_* \ll t \ll t_{b2}$$

В этом временном интервале вклад сорбирующих включений в сравнении с блоками первого типа является доминирующим. Значения переменной Лапласа находятся в интервале  $t_{b2}^{-1} \ll p \ll t_*^{-1}$ , и согласно (4.31), (4.21) величина  $\Omega(p) \approx \sqrt{\frac{p}{t_{a2}}}$ . Подстановка этого выражения в (4.30) и последующее обратное преобразование Лапласа приводят к выражениям:

$$\begin{aligned}
N(t) &\cong N_0 \sqrt{\frac{t_{a2}}{\pi t}}, \\
X(t) &\cong \sqrt{\pi D_{u2} t}, \\
\sigma_{\parallel}(t) &\cong \sqrt{(4 - \pi) D_{u2} t}, \\
\sigma_{\perp}(t) &\cong 2\sqrt{D \sqrt{\pi t_{a2} t}}.
\end{aligned} \tag{4.39}$$

Здесь

$$D_{u2} = u^2 t_{a2} \tag{4.40}$$

Эти формулы могут быть получены из (4.35), (4.36) путем замены  $t_{a1}$  на  $t_{a2}$ .

Соответственно, в интервале  $t_{b1} \frac{t_{a2}}{t_{a1}} \ll t \ll t_{b2}$  в продольном направлении реализуются

режим квазидиффузии-II, а в поперечном – субдиффузия-II при  $\sigma_{\perp}(t) \propto t^{\frac{1}{4}}$ .

##### 5. $t \gg t_{b2}$

На этих временах сорбирующие включения, как и блоки первого типа, также насыщены примесью. Значения переменной Лапласа удовлетворяют неравенству  $p \ll t_{b2}^{-1}$ . Поэтому в соответствии с равенствами (4.31) и (4.21) имеем

$\Omega(p) \cong p \sqrt{\frac{t_{b2}}{t_{a2}}}$ . Подстановка этого выражения (4.30) с последующим обратным

преобразованием Лапласа дает:

$$\begin{aligned}
N(t) &\cong N_2, \\
X(t) &\cong u_2 t, \\
\sigma_{\parallel}(t) &\cong \sqrt{2D_2 t}, \\
\sigma_{\perp}(t) &\cong 2\sqrt{D_2 t}.
\end{aligned} \tag{4.41}$$

Здесь обозначено:

$$N_2 = N \sqrt{\frac{t_{a2}}{t_{b2}}}, \quad \vec{u}_2 = \vec{u} \sqrt{\frac{t_{a2}}{t_{b2}}}, \quad D_2 = D \sqrt{\frac{t_{a2}}{t_{b2}}}. \tag{4.42}$$

Учитывая неравенство  $\sqrt{\frac{t_{a2}}{t_{b2}}} \ll 1$ , здесь реализуется замедленный режим классической диффузии–адвекции-II с перенормированными количеством активных частиц примеси, средней скоростью и дисперсией.

На рис. 4.2 и 4.3 схематически показаны зависимости от времени числа частиц примеси в трещинах и их среднего смещения.

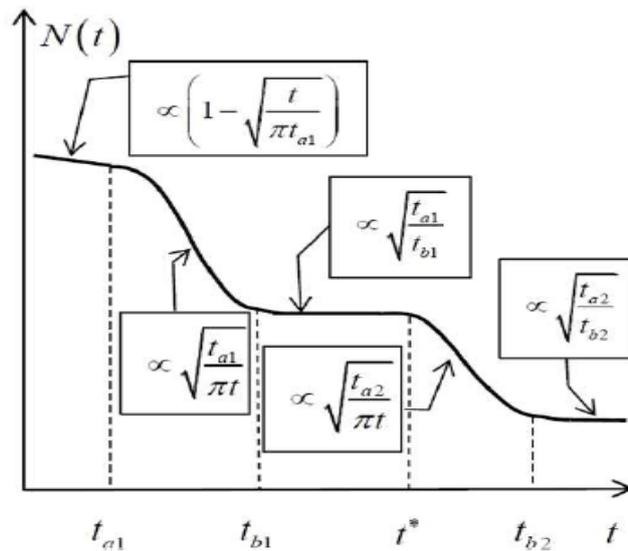


Рис.4.2 Схематичная зависимость общего числа активных частиц примеси  $N(t)$  от времени.

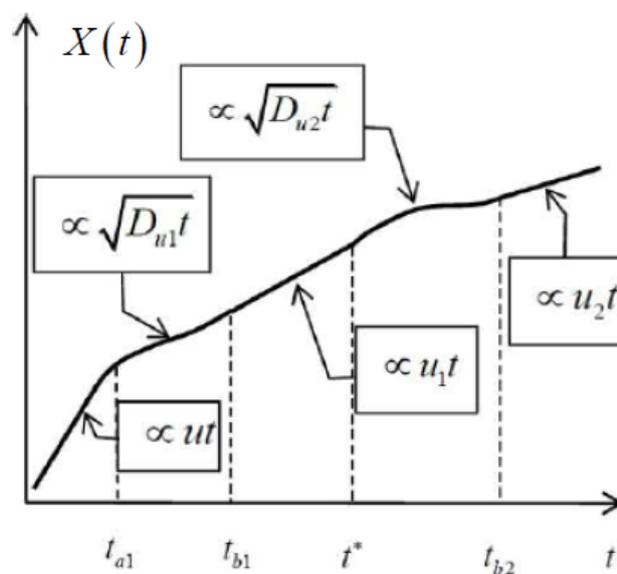


Рис.4.3 Схематичная зависимость среднего смещения  $X(t)$  от времени.

II.  $t_{a2} < t_{a1}$ .

В этом случае последовательность режимов переноса полностью определяется блоками второго типа (сорбирующими включениями): сначала реализуется почти классическая адвекция-диффузия, затем - квазидиффузия (II) (4.35) - в продольном направлении и субдиффузия II в поперечном направлении, и наконец, наступает режим медленной адвекции-диффузии (II), определяемая формулами (4.41), (4.42).

В заключение этого раздела отметим, что время  $t_{b2}$ , определяющее установление окончательного режима переноса, может быть довольно большим. Например, с учетом типичного значения коэффициента диффузии примеси в растворе  $d \approx 10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$  для размера включений порядка  $R_2 \approx 10 \text{ cm}$  и коэффициента задержки  $K \approx 10^2$  получаются, что  $t_{b2} \approx 10^{10} \text{ s} \approx 300 \text{ лет}$ .

### 4.3 Концентрации на асимптотически больших расстояниях

Для анализа поведения концентрации на асимптотически далеких расстояниях от источника (больших в сравнении с размером основной области локализации примеси), перейдем в равенстве (4.29) к обратному преобразованию Фурье-Лапласа и далее проведем интегрирование по волновому вектору. В результате придем к следующему выражению для концентрации в пространственно-временном представлении

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_0}{4\pi D r} \int_{b-i\infty}^{b+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp(-\Gamma_p(\vec{r}) + pt), \quad \text{Re } b > 0, \quad (4.43)$$

где

$$\Gamma_p(\vec{r}) = -\frac{\vec{u}\vec{r}}{2D} + \frac{ur}{2D} \sqrt{1 + t_u [p + \Lambda_1(p) + \Lambda_2(p)]} \quad (4.44)$$

В асимптотической области переменных имеет место неравенство  $\Gamma_p(\vec{r}) \gg 1$ , благодаря которому вычисление интеграла в (4.43) может быть проведено методом стационарной фазы. В итоге приходим к выражению

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_0}{Dr} \frac{\exp(-\Gamma_p(\vec{r}) + pt)}{\sqrt{32\pi^3 \left| \frac{\partial^2 \Gamma_p(\vec{r})}{\partial p^2} \right|}} \Bigg|_{p=p_0}, \quad (4.45)$$

где  $p_0$  - стационарная точка, определяемая из уравнения

$$\left. \frac{\partial \Gamma_p(\vec{r})}{\partial p} \right|_{p=p_0} = t, \quad (4.46)$$

Заметим, что с ростом  $r$ , или с уменьшением  $t$  происходит увеличение  $p_0$ . Отсюда, как было уже отмечено в предыдущей главе, следует, что в условиях, когда со временем происходит смена режимов переноса, асимптотика концентрации на далеких расстояниях является многоступенчатой. Каждая ступень определяется своим режимом переноса и чем более далекая ступень, тем более ранним режимом она устанавливается, а самая близкая - определяется текущим режимом. Поэтому знание выражений для ближних ступеней асимптотик на всех временных интервалах достаточно для восстановления многоступенчатых асимптотик на всех временах. Поэтому далее займемся вычислением ближайших ступеней асимптотик в различных временных интервалах - в соответствии с классификацией предыдущего раздела.

$$\text{I. } \underline{t_{a1} \ll t_{a2}}.$$

$$1. t \ll t_{a1}.$$

Эти времена соответствуют  $p \gg t_{a1}^{-1}$ . Поэтому из (4.44) и (4.46) с учетом (4.21) получаем

$$\Gamma_p(\vec{r}) \cong -\frac{\bar{u}\vec{r}}{2D} + \frac{ur}{2D} \sqrt{1+t_u p}, \quad (4.47)$$

$$p_0 = \frac{1}{t_u} \left( \frac{4r^2}{u^2 t^2} - 1 \right) \quad (4.48)$$

Подставляя эти выражения в (4.45), находим:

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_0}{(4\pi Dt)^{3/2}} \exp \left[ -\frac{(\vec{r} - \bar{u}t)^2}{4Dt} \right], \quad (4.49)$$

$$\frac{(\vec{r} - \bar{u}t)^2}{4Dt} \gg \frac{t}{t_{a1}}, 1.$$

$$2. t_{a1} \ll t \ll t_{b1}$$

Эти времена соответствуют  $t_{b1}^{-1} \ll p \ll t_{a1}^{-1}$ . Поэтому из (4.44) и (4.46) с учетом (4.21) получаем

$$\Gamma_p(\vec{r}) = -\frac{\bar{u}\vec{r}}{2D} + \frac{ur}{2D} \left( 1 + \frac{t_u}{2} \sqrt{\frac{p}{t_{a1}}} \right), \quad (4.26)$$

$$p_0 = \frac{r^2}{4D_{u1}t^2}, \quad (4.51)$$

Подставляя эти выражения в (4.45), находим:

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_0 \frac{D_{u1}}{D}}{(4\pi D_{u1}t)^{3/2}} \exp\left[-\frac{r^2}{4D_{u1}t} - \frac{ur - \vec{u}\vec{r}}{2D}\right], \quad (4.52)$$

$$\frac{t}{t_{b1}}, 1 \ll \frac{r^2}{4D_{u1}t^2} \ll \frac{t}{t_{a1}}.$$

$$3. \quad t_{b1} \ll t \ll t_*, \quad t_* = t_{b1} \frac{t_{a2}}{t_{a1}}.$$

Здесь вклад блоков первого типа по-прежнему доминирует, и  $p \ll t_{b1}^{-1}$ . Поэтому из (4.44) и (4.46) с учетом (4.21) получаем

$$\Gamma_p(\vec{r}) \cong -\frac{\vec{u}_1 \vec{r}}{2D_1} + \frac{u_1 r}{2D_1} \sqrt{1 + t_{u1} p}, \quad (4.53)$$

$$p_0 = \frac{1}{t_{u1}} \left( \frac{4r^2}{u_1^2 t^2} - 1 \right) \quad (4.54)$$

$$\text{Здесь } t_{u1} = \frac{4D_1}{u_1^2}.$$

Подставляя выражения (4.53) и (4.54) в (4.45), находим:

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_1}{(4\pi D_1 t)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \vec{u}_1 t)^2}{4D_1 t}\right], \quad (4.49)$$

$$\frac{t}{t_*}, 1 \ll \frac{(\vec{r} - \vec{u}_1 t)^2}{4D_1 t} \ll \frac{t}{t_{b1}}.$$

Величины  $N_1$ ,  $\vec{u}_1$  и  $D_1$  определены равенствами (4.38).

$$4. \quad t_* \ll t \ll t_{b2}$$

Здесь вклад сорбирующих включений становится доминирующим и  $t_{a2}^{-1} \ll p \ll t_{b2}^{-1}$ .

Поэтому из (4.44) и (4.46) с учетом (4.21) получаем

$$\Gamma_p(\vec{r}) = \frac{u_2 r - (\vec{u}_2 \vec{r})}{2D_2} + \sqrt{\frac{p}{D_{u2}}}, \quad (4.27)$$

$$p_0 = \frac{r^2}{4D_{u_2}t^2}, \quad (4.51)$$

Подставляя эти выражения в (4.45), находим:

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_0 \frac{D_{u_2}}{D}}{(4\pi D_{u_2}t)^{\frac{3}{2}}} \exp\left[-\frac{r^2}{4D_{u_2}t} - \frac{ur - \vec{u}\vec{r}}{2D}\right], \quad (4.52)$$

$$\frac{t}{t_{b_2}}, 1 \ll \frac{r^2}{4D_{u_2}t} \ll \frac{t}{t_*}.$$

Напомним, что величина  $D_{u_2}$  определена равенством (4.40)

5.  $t \gg t_{b_2}$

На этих временах сорбирующие включения уже полностью насыщены примесью и  $p \ll t_{b_2}^{-1}$ . Поэтому из (4.44) и (4.46) с учетом (4.21) получаем

$$\Gamma_p(\vec{r}) \cong -\frac{\vec{u}_2\vec{r}}{2D_2} + \frac{u_2r}{2D_2} \sqrt{1 + t_{u_2}p}, \quad (4.53)$$

$$p_0 = \frac{1}{t_{u_2}} \left( \frac{4r^2}{u_2^2 t^2} - 1 \right) \quad (4.54)$$

Здесь  $t_{u_2} = \frac{4D_2}{u_2^2}$ .

Подставляя выражения (4.53) и (4.54) в (4.45), находим:

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{N_2}{(4\pi D_2 t)^{3/2}} \exp\left[-\frac{(\vec{r} - \vec{u}_2 t)^2}{4D_2 t}\right], \quad (4.49)$$

$$1 \ll \frac{(\vec{r} - \vec{u}_2 t)^2}{4D_2 t} \ll \frac{t}{t_{b_2}}.$$

Величины  $N_2$ ,  $\vec{u}_2$  и  $D_2$  определены равенствами (4.42).

II.  $t_{a_2} < t_{a_1}$ ,  $t_{b_2} > t_{b_1}$ .

При таком соотношении между характерными временами ближайшие ступени асимптотик определяются следующими формулами: (4.49) при  $t < t_{a_2}$ , (4.52) при  $t_{a_2} \ll t < t_{b_2}$  и (4.59) при  $t \gg t_{b_2}$ .

#### 4.4 Выводы

Основные результаты главы состоят в следующем.

Разработана модель переноса примеси в насыщенной статистически однородной трещиновато-пористой среде, содержащей редкие сорбирующие включения. Установлены режимы переноса и вычислены асимптотики концентрации на далеких расстояниях от источника примеси. Режимы переноса характеризовались зависящими от времени числом частиц примеси в каналах (активных частиц примеси), средним смещением примеси и дисперсией в распределении активных частиц.

Ключевыми параметрами, определяющими режимы и структуру асимптотик, являются характерные времена, которые выражаются через характеристики среды - трещиноватость, объемная доля сорбирующих включений, пористость в блоках и во включениях, размеры блоков и включений, коэффициент сорбции во включениях. Проанализирована роль различных подсистем среды в формировании режимов переноса.

В зависимости от того, в какой интервал попадет текущее время, реализуется один из пяти режимов переноса: классическая адвекция-диффузия трех типов – быстрая, замедленная и сверхзамедленная, квазидиффузия – относительно быстрая и замедленная. С течением времени число активных частиц, а также скорости изменения смещения и дисперсии убывают, достигая минимума на самых поздних временах, когда устанавливается равновесие по распределению примеси между трещинами и слабопроницаемыми блоками обоих типов.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основные результаты диссертации состоят в следующем.

1. Концентрация примеси при классической диффузии в неоднородной среде на расстояниях, значительно превосходящих размер основной области локализации примеси, сведено к интегралам вдоль линии, условно названной траекторией концентрационного сигнала. Сама траектория определяется из обыкновенного дифференциального уравнения первого порядка, вытекающего из вариационного принципа (аналога принципа Ферма).
2. Решение задачи об адвекции-диффузии в неоднородных средах при определенных ограничительных условиях сведено к классической формуле, в которой элемент, описывающий дисперсию примеси, сведен к линейному интегралу от коэффициента диффузии вдоль адвекционного смещения примеси.
3. Путем применения формализма криволинейной геометрии, заимствованного из общей теории относительности, построена асимптотическая теория классической анизотропной диффузии в среде с крупномасштабными неоднородностями.
4. В асимптотической теории переноса примеси в регулярно неоднородной резко контрастной среде (модели Дыхне) с параметрами, зависящими от координат, траектория концентрационного сигнала на ранних временах является плоской, а на поздних – объемной.
5. Разработана модель переноса примеси в насыщенной статистически однородной трещиновато-пористой среде, содержащей редкие сорбирующие включения. Установлены режимы переноса и вычислены асимптотики концентрации на далеких расстояниях от источника примеси. В том случае, когда сорбционная емкость включений превышает критическую величину, на поздних временах реализуются два дополнительных режима переноса – медленная квазидиффузия и сверхзамедленная адвекция-диффузия.

## **БЛАГОДАРНОСТИ**

В заключение приношу искреннюю благодарность моему научному руководителю Петру Сергеевичу Кондратенко за постановку задач, постоянные обсуждения и помощь, оказанную им на всех этапах выполнения работы.

Хотелось бы поблагодарить Юрия Николаевича Обухова, Александра Дмитриевича Васильева и Леонида Владимировича Матвеева за плодотворные дискуссии, советы и поддержку, а также Валентина Евграфовича Калантарова за помощь при решении организационных вопросов.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1

В этом приложении будут получены выражения концентрации примеси при диффузии в однородной изотропной среде -  $\tilde{c}(\vec{r}, t)$  в пространстве размерностями  $\delta = 1, 2, 3$  с коэффициентом диффузии  $D = D(0)$ .

Переходя в (1.1) в представление Фурье по пространственной переменной приходим к уравнению

$$\frac{\partial \tilde{c}_{\vec{k}}(t)}{\partial t} + D(0) \vec{k}^2 \tilde{c}_{\vec{k}}(t) = 0. \quad (\text{П.1.1})$$

Здесь  $\vec{k}$  - волновой вектор размерности  $\delta$ . Решением уравнения (П.1.1) с начальным условием (1.2) является выражение

$$\tilde{c}_{\vec{k}}(t) = N \exp(-D(0) \vec{k}^2 t). \quad (\text{П.1.2})$$

Выполняя здесь обратное преобразование Фурье приходим к выражению для концентрации в пространственно-временном представлении при диффузии в однородной изотропной среде в пространстве размерностью  $\delta = 1, 2, 3$ :

$$\tilde{c}(\vec{r}, t) = \frac{N}{(4\pi D(0)t)^{\frac{\delta}{2}}} \exp\left(-\frac{\vec{r}^2}{4D(0)t}\right). \quad (\text{П.1.3})$$

## ПРИЛОЖЕНИЕ 2

В этом приложении получим выражение для концентрации примеси при диффузии в однородной анизотропной среде -  $\tilde{c}(\vec{r}, t)$  в трехмерном пространстве с коэффициентом диффузии  $D^{ik} = D^{ik}(0)$ .

Переходя в (2.1) в представление Фурье по пространственной переменной приходим к уравнению

$$\frac{\partial \tilde{c}_{\vec{k}}(t)}{\partial t} + D^{ik}(0) k_i k_k \tilde{c}_{\vec{k}}(t) = 0. \quad (\text{П.2.1})$$

Решением этого уравнения с начальным условием (1.2) является выражение

$$\tilde{c}_{\vec{k}}(t) = N \exp(-D^{ik}(0) k_i k_k t). \quad (\text{П.2.2})$$

Выполняя здесь обратное преобразование Фурье, приходим к выражению для концентрации в пространственно-временном представлении при диффузии в однородной анизотропной среде:

$$\tilde{c}(\vec{r}, t) = \frac{N}{\sqrt{D_0 (4\pi t)^3}} \exp\left(-\frac{D_{ik}(0) x^i x^k}{4t}\right). \quad (\text{П.2.3})$$

Здесь  $D_0 = \det[D^{ik}(0)]$ .

### ПРИЛОЖЕНИЕ 3

*Трансформация закон Снеллиуса при диффузии в анизотропных средах.*

Целью этого приложения является вывод формул для траектории концентрационного сигнала в том случае, когда источник примеси и точка наблюдения лежат по разные стороны плоской границы между двумя однородными анизотропными средами с различающимися тензорами диффузии,  $D_{ik}^{(1)}$  и  $D_{ik}^{(2)}$ .

Введем декартову систему координат, в которой плоскость  $x, y$  совпадает с плоской границей раздела между двумя средами, ось  $x$  проходит через проекции источника примеси и точки наблюдения на границу раздела, а ось  $z$ , естественно, направлена по нормали к границе. Начало координат выберем так, чтобы оно совпадало с проекцией источника на границу раздела. Значение проекции точки наблюдения на ось  $x$  обозначим  $a$ . Проекция источника примеси и точки наблюдения на ось  $z$  обозначим, соответственно,  $-h_1$  и  $h_2$ , так что отвечающие им радиус-векторы есть

$$\vec{r}_1 = \{0, 0, -h_1\}, \quad \vec{r}_2 = \{a, 0, h_2\}. \quad (\text{ПЗ.1})$$

Обозначим далее

$$\vec{r}_0 = \{x_0, y_0, 0\} \quad (\text{ПЗ.1})$$

- радиус-вектор точки пересечения траектории концентрационного сигнала с границей раздела и введем векторы

$$\vec{R}_{1,2} = \vec{r}_0 - \vec{r}_{1,2}. \quad (\text{ПЗ.2})$$

В рассматриваемом здесь случае траектория концентрационного сигнала состоит из двух прямолинейных отрезков, переходящих один в другой в точке  $\vec{r}_0$ . Поэтому квазиэikonал записывается в форме:

$$\begin{aligned} \Gamma_p &= \gamma \sqrt{p}, & \gamma &= \gamma_1 + \gamma_2, \\ \gamma_n &= \sqrt{D_{ik}^{(n)} R_{(n)}^i R_{(n)}^k}, & n &= 1, 2. \end{aligned} \quad (\text{ПЗ.3})$$

Вариационный принцип касается теперь исключительно только положения точки пересечения траектории с границей раздела  $\vec{r}_0$ :

$$\frac{\partial \gamma}{\partial x_0} = 0, \quad \frac{\partial \gamma}{\partial y_0} = 0. \quad (\text{ПЗ.4})$$

С учетом равенств (ПЗ.3) эти уравнения приобретают вид:

$$\begin{aligned} \frac{D_{1k}^{(1)} R_{(1)}^k}{\gamma_1} + \frac{D_{1k}^{(2)} R_{(2)}^k}{\gamma_2} &= 0, \\ \frac{D_{2k}^{(1)} R_{(1)}^k}{\gamma_1} + \frac{D_{2k}^{(2)} R_{(2)}^k}{\gamma_2} &= 0 \end{aligned} \quad (ПЗ.5)$$

Отметим, что решение этой системы, соответствующее  $y_0 = 0$ , отвечает тому, что плоскость, содержащая траекторию концентрационного сигнала, перпендикулярна границе раздела. Однако, в общем случае анизотропных сред система (ПЗ.5) с учетом выражений (ПЗ.3) не дает оснований для такого решения.

Рассмотрим частный случай, когда оба тензора диффузии соответствуют одноосной анизотропии, причем обе оси направлены по нормали к границе раздела между средами. Тогда в избранной нами системе координат оба тензора диффузии будут диагональными, причем

$$D_{xx}^{(n)} = D_{yy}^{(n)} = D_{\perp}^{(n)}, \quad D_{zz}^{(n)} = D_{\parallel}^{(n)}, \quad D_{\perp}^{(n)}, D_{\parallel}^{(n)} > 0, \quad (ПЗ.6)$$

а система уравнений (ПЗ.5) сводится к системе

$$\begin{aligned} \frac{D_{\perp}^{(1)} x_0}{\gamma_1} + \frac{-D_{\perp}^{(2)} (a - x_0)}{\gamma_2} &= 0, \\ \left( \frac{D_{\perp}^{(1)}}{\gamma_1} + \frac{D_{\perp}^{(2)}}{\gamma_2} \right) y_0 &= 0. \end{aligned} \quad (ПЗ.7)$$

Решением последней является

$$\begin{aligned} x_0 &= \frac{D_{\perp}^{(2)} \gamma_1 a}{D_{\perp}^{(1)} \gamma_2 + D_{\perp}^{(2)} \gamma_1}, \\ y_0 &= 0. \end{aligned} \quad (ПЗ.8)$$

Следовательно, поскольку  $y_0 = 0$ , траектория концентрационного сигнала в этом случае лежит в плоскости перпендикулярной плоскости границы раздела двух сред.

В изотропной среде  $D_{ik}^{(n)} = (D^{(n)})^{-1} \delta_{ik}$ , и система (3.5) с учетом (ПЗ.3) переходит в систему:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sqrt{D^{(1)}}} \frac{x_0}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2 + h_1^2}} - \frac{1}{\sqrt{D^{(2)}}} \frac{a - x_0}{\sqrt{(a - x_0)^2 + y_0^2 + h_2^2}} &= 0, \\ \left( \frac{1}{\sqrt{D^{(1)}}} \frac{1}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2 + h_1^2}} + \frac{1}{\sqrt{D^{(2)}}} \frac{1}{\sqrt{(a - x_0)^2 + y_0^2 + h_2^2}} \right) y_0 &= 0 \end{aligned} \quad (5)$$

Отсюда приходим к обычному закону Снеллиуса:

$$y_0 = 0, \quad \frac{\sin \theta_1}{\sqrt{D^{(1)}}} = \frac{\sin \theta_2}{\sqrt{D^{(2)}}}. \quad (6)$$

Здесь

$$\sin \theta_1 = \frac{x_0}{\sqrt{x_0^2 + y_0^2 + h_1^2}}, \quad \sin \theta_2 = \frac{a - x_0}{\sqrt{(a - x_0)^2 + y_0^2 + h_2^2}}. \quad (6)$$

и  $\theta_1, \theta_2$  -- углы между траекторией и нормалью к границе раздела в среде 1 и 2, соответственно.

Таким образом, если хотя бы одна из двух сред является анизотропной, то в общем случае  $y_0 \neq 0$  и, следовательно, траектория концентрационного сигнала лежит в плоскости, не являющейся нормальной к границе раздела. Исключение представляет случай, когда оба тензора диффузии соответствуют одноосной анизотропии и обе оси перпендикулярны границе раздела.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 4

Цель этого приложения состоит в том, чтобы показать, что, если тензор диффузии пропорционален единичному тензору, то асимптотическое выражение для концентрации примеси при анизотропной диффузии переходит в соответствующее выражение для изотропной среды. В соответствии с определениями (2.4) - (2.6) при

$$D^{ik} = D\delta_{ik}, \quad D^{ik} = D^{-1}\delta_{ik}. \quad (\text{П.4.1})$$

метрический тензор  $g_{ik}$ , вектор  $u^i$  и дифференциал интервала  $ds$  приобретают вид

$$g_{ik} = \frac{p}{D(0)}n^2\delta_{ik}, \quad g^{ik} = \frac{D(0)}{p} \frac{\delta_{ik}}{n^2}. \quad (\text{П.4.2})$$

и

$$u^i = \sqrt{\frac{D(0)}{p}} \frac{v_i}{n}, \quad (\text{П.4.3})$$

$$ds = \sqrt{\frac{p}{D(0)}}ndl \quad (\text{П.4.4})$$

Здесь использованы введенные в Гл. 1 обозначения  $n = \sqrt{\frac{D(0)}{D(\vec{r})}}$  и  $\vec{v} = \frac{\nabla\Gamma_p}{|\nabla\Gamma_p|}$ .

Из (П4.3), (П4.4) получаем

$$\frac{du^i}{ds} = \frac{D(0)}{pn^2} \left( \frac{dv_i}{dl} - \frac{1}{n}v_i(\vec{v}\nabla n) \right). \quad (\text{П.4.5})$$

Подставляя (П1.1) в (2.12), находим

$$\left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} = \frac{1}{n} \left( \frac{\partial n}{\partial x_j} \delta_{ik} + \frac{\partial n}{\partial x_k} \delta_{ij} - \frac{\partial n}{\partial x_i} \delta_{jk} \right). \quad (\text{П.4.6})$$

Отсюда с учетом (П4.3) имеем

$$\left\{ \begin{matrix} i \\ jk \end{matrix} \right\} u^j u^k = \frac{D(0)}{pn^3} \left( 2v_i(\vec{v}\nabla n) - \frac{\partial n}{\partial x_i} \right). \quad (\text{П.4.7})$$

Подставляя (П4.5) и (П4.7) в (2.11) получаем уравнение для траектории концентрационного сигнала для изотропной диффузии (1.10).

Далее замечаем, что в соответствии с определением (1.8) и с учетом равенств (П4.3) (П4.4) имеем

$$ds = \sqrt{\frac{p}{D(0)}} d\psi, \quad ds \partial_i u^1 = d\psi \operatorname{div} \left( \frac{\vec{v}}{n} \right), \quad \frac{ds}{s} = \frac{d\psi}{\psi}. \quad (\text{П.4.8})$$

Отсюда следует, что при условии (П4.1) выражение для квазиэйконала в анизотропной среде (2.9) переходит в соответствующее выражение для изотропной диффузии. Кроме того, при том же условии, для размерности пространства  $\delta = 3$  имеет место равенство

$$H_a(\vec{r}) = H(\vec{r}). \quad (\text{П.4.9})$$

Учитывая, наконец, что при условии (П4.1) справедливо равенство

$$D_0 = \det [D^{ik}(0)] = D^3(0), \quad (\text{П.4.9})$$

приходим к выводу, что при том же условии окончательное выражение для концентрации при анизотропной диффузии (2.20) переходит в соответствующее выражение для изотропной диффузии (1.19) для размерности пространства  $\delta = 3$ . Само собой разумеется, что точно такое же соответствие имеется и при  $\delta = 2$ . Что касается размерности  $\delta = 1$ , то там анизотропия, понятно, невозможна в принципе.

## Литература

1. *Fick A.* On liquid Diffusion // The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science — 1855. — Vol. 10:63. — pp. 30-39.
2. *Scher H., Lax M.* Continuous time random walk model of hopping transport: application to impurity conduction // J. Non-Crystalline Solids. — 1972. — Vol. 8 — pp. 497.
3. *Scher H., Lax M.* Stochastic Transport in a Disordered Solid. I. Theory // Phys. Rev. B. — 1973. — Vol. 7. — pp. 4491.
4. *Qing Gu et al.* Non-Gaussian Transport Measurements and the Einstein Relation in Amorphous Silicon // Phys. Rev. Lett. — 1996. — Vol. 76. — pp. 3196–3199.
5. *Bernasconi J., Beyeler H. U., Strässler S., and Alexander S.* // Phys. Rev. Lett. — 1979.— Vol. 42. — pp. 819–822.
6. *Blom P. W. M., M.Vissenberg M. C. J.* Dispersive hole transport in poly (phenyle nevinylene) // Phys. Rev. Lett. — 1998. — Vol. 80. — pp. 3819-3822.
7. *Amblard F., Maggs A. C., Yurke B.* Subdiffusion and anomalous local visco elasticity in actin networks // Phys. Rev. Lett. — 1996. — Vol. 77. — pp. 4470-4473.
8. *Douglas S. Martin, Martin B. Forstner, Josef A. Kas.* Apparent Subdiffusion Inherent to Single Particle Tracking // Biophys. J. — 2002. — Vol. 83(4) . — pp. 2109-2117.
9. *Schultz G. J., Schindler H., Schmidt Th.* Single-Molecule Microscopy on Model Mem- branes Reveals Anomalous Diffusion // Biophys. J. — 1997. — Vol. 73. — pp. 1073-1080.
10. *Weiss M. et al.* Anomalous Protein Diffusion in Living Cells as Seen by Fluorescence Correlation Spectroscopy // Biophys J. — 2003. — Vol. 84(6) . — pp. 4043.
11. *Banks D. S., Fradin C.* Anomalous Diffusion of Proteins Due to Molecular Crowding // Biophys. J. — 2005. — Vol. 89. — pp. 2960.
12. *Klemm A., Mueller H.-P., Kimmich R.* Nmr microscopy of pore-space backbones in rock, sponge, and sand in comparison with random percolation model objects // Phys.Rev. E.— 1997. — Vol. 55.— pp. 4413-4423.
13. *Drazer G., Zanette D.* Experimental evidence of power-law trapping-time distributions in porous media// Phys. Rev. E. — 1999. — Vol. 60(5) . — pp. 5858
14. *Gregoire G., Chate H., Tu Y.* Active and passive particles: Modeling beads in a bacterial bath // Phys. Rev. E. — 2001. — Vol. 64. — pp. 011902.

15. *Klafter J., White B.S., Levandowsky M.* in: W. Alt, J. Hoffmann (Eds.) // *Biological Motion, Lecture Notes in Biomathematics* — 1990 — Vol. 89, Springer, Berlin.
16. *Stolt K., Graham W. R., Ehrlich G.* Surface diffusion of individual atoms and dimers: Re on W(211) // *J. Chem. Phys.* — 1976. — Vol. 65. — pp. 3206.
17. *Luedtke W. D., Landman U.* Slip Diffusion and Lévy Flights of an Adsorbed Gold Nanocluster // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 82. — pp. 3835.
18. *Leonid Bolshov, Peter Kondratenko, Karsten Pruess and Vladimir Semenov* Nonclassical Transport Processes in Geologic Media: Review of Field and Laboratory Observations and Basic Physical Concepts // *Vadose Zone Journal* — 2008. — Vol. 7. — No. 4. — pp. 1181-1190.
19. *Richardson L.F.* Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbor graph // *Proc. Roy. Soc. Ser. A.* — 1926. — Vol. 110(756). — pp. 709-720.
20. *Batchelor G. K.* Diffusion in a field of homogeneous turbulence // *Proc. Cambridge Phil. Soc.* — 1952. — Vol. 48(2). — pp. 345–363.
21. *Batchelor G. K.* The application of the similarity theory of turbulence to atmospheric diffusion // *Q.J.R. Meteorol. Soc.* — 1952. — Vol. 76. — pp. 133–146
22. *Shlesinger M. F., West B. J., Klafter J.* Lévy dynamics of enhanced diffusion: application to turbulence // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 58. — pp.1100.
23. *Sokolov I., Blumen A., Klafter J.* Drude approach to anomalous diffusion: application to Richardson dispersion in turbulent flow // *Europhys. Lett.* — 1999. — Vol. 47. — pp.152.
24. *Balescu R.* Anomalous transport in turbulent plasmas and continuous time random walks // *Phys. Rev. E.* — 1995. — Vol. 51. — pp. 4807.
25. *Okubo A. A.* Review of theoretical models for turbulent diffusion in the sea // *J. Oceanogr. Soc. Jpn.* — 1962. — Vol. 20. — pp. 286–320.
26. *Scher H., Montroll E.* Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids // *Phys. Rev. B.* — 1975. — Vol. 12. — pp. 2455.
27. *Montroll E., Weiss G.* Random walks on lattices II // *J. Math. Phys.* — 1965. — Vol. 6. — pp.167.
28. *Berkowitz B., Cortis A., Dentz M., and Scher H.* Modeling non-Fickian transport in geological formations as a continuous time random walk // *Rev. Geophys.* — 2006. -  
Vol. 44, P. 49

29. *Schumer R., Meerschaert M., Baeumer B.* Fractional advection-dispersion equations for modeling transport at the Earth surface // *Journal of Geophysical Research*. — 2009. — Vol. 114 — pp. F00A07.
30. *Fedotov S., Iomin A.* Migration and proliferation dichotomy in tumor-cell invasion // *Phys Rev Lett*. — 2007. — Vol. 98(11). — pp. 8101.
31. *Slutsky M. and Mirny L.A.* Kinetics of protein-DNA interaction: Facilitated target location in sequence-dependent potential // *Biophys J*. — 2004. — Vol. 87. — pp. 4021–4035.
32. *Hilfer R.* Stochastische Modelle für die betriebliche Planung // GBI-Verlag, Munich, 1984
33. *Scalas E., Gorenflo R. and Mainardi F.* Fractional calculus and continuous-time finance // *Physica A*. — 2000. — Vol. 284. — pp. 376–384.
34. *Mainardi F. et al.* Fractional calculus and continuous-time finance II: the waiting-time distribution // *Physica A*. — 2000. — Vol. 287. — pp. 468481.
35. *Masoliver J., Montero M., Weiss G.H.* Continuous-time random-walk model for financial distributions // *Phys. Rev. E*. — 2000. — Vol. 67. — pp. 021112.
36. *Sabatelli L. et al* Waiting time distribution in financial markets // *Eur. Phys. J. B*. — 2002. — Vol. 27. — pp. 273–275.
37. *Mandelbrot B., van Ness J.W.* Fractional Brownian motions, fractional noises and applications // *SIAM Review*. — 1968. — Vol. 10(4). — pp. 422–437.
38. *Falconer K.* Fractal Geometry: Mathematical Foundations and Applications // UK, Chichester: John Wiley and Sons Ltd, 1990.
39. *O'Shaughnessy B., Procaccia I.* Analytical Solutions for Diffusion on Fractal Objects // *Phys. Rev. Lett*. — 1985. — Vol. 54. — pp. 455.
40. *Seshadri V., West B. J.* Fractal dimensionality of Lévy processes // *Proc. Natl. Acad. Sci. USA*. — 1982. — Vol. 79. — pp. 4501.
41. *Seshadri V., West B. J.* Linear-systems with levy fluctuation // *Physica A*. — 1982. — Vol. 113(1-2). — pp. 203–216.
42. *Pesceckis F.* Statistical dynamics of stable processes // *Phys. Rev. A*. — 1987. — Vol. 36. — pp. 892–902.
43. *Fogedby H.C.* Lévy Flights in Random Environments // *Phys. Rev. Lett*. — 1994. — Vol. 73. — pp. 2517–2520.

44. *Kubo R., Toda M., Hashitsume N.* Non equilibrium statistical mechanics // Springer Series in Solid state Sciences. — 1985. — Vol. 31, Berlin: Springer.
45. *Muralidhar R., Ramkrishna D., Nakanishi H., Jacobs D.* Anomalous diffusion: A dynamic perspective // *Physica A.* — 1990. — Vol. 167. — P. 539.
46. *Wang K.G. et al.* // *Physica A.* — 1994. — Vol. 203. — P. 53.
47. *Wang K.G., Tokuyama M.* Non equilibrium statistical description of anomalous diffusion // *Physica A.* — 1999. — Vol. 265. — P. 341.
48. *Kenkre V.M., Montroll E.W., Shlesinger M.F.* Generalized Master Equations for Continuous-Time Random Walks // *J. Stat. Phys.* — 1973. — Vol. 9. — pp. 45–50.
49. *Oppenheim I., Shuler K.E., Weiss G.H.* Stochastic Processes in Chemical Physics: The Master Equation. — Cambridge, Massachusetts: MIT Press, 1977.
50. *Metzler R., Klafter J.* The Random Walk's Guide to Anomalous Diffusion: A Fractional Dynamics Approach // *Phys. Rep.* — 2000. — Vol. 339. — pp. 1–77.
51. *Sokolov I. M., Klafter J.* From diffusion to anomalous diffusion: a century after Einstein's Brownian motion // *Chaos.* — 2005. — Vol. 15(2). — pp. 026103.
52. *Barkai E., Fleurov V.N.* Generalized Einstein relation: A stochastic modeling approach // *Phys. Rev. E.* — 1998. — Vol. 58(2). — pp. 1296.
53. *Balakrishnan V.* Anomalous diffusion in one dimension // *Physica A.* 1985. — Vol. 132. — P. 569
54. *Wyss W.* The fractional diffusion equation // *J. Math. Phys.* — 1986. — Vol. 27. — pp. 2782.
55. *Compte A.* Stochastic foundations of fractional dynamics // *Phys. Rev. E.* — 1996. — Vol. 53. — pp. 4191.
56. *Metzler R., Glockle W. G., Nonnenmacher T. F.* Fractional model equation for anomalous diffusion // *Physica A.* — 1994. — Vol. 211. — pp. 13–24.
57. *Gorenflo R., Mainardi F.* Fractional Calculus and Stable Probability Distributions // *Arch. Mechanics.* — 1998. — Vol. 50 (3) . — pp. 377–388.
58. *Чукбар К.В.,* Стохастический перенос и дробные производные// *ЖЭТФ* . —1995. — т. 108. — стр. 1875-1879.
59. *Kolwankar K. M., Gangal A. D.* Local fractional fokker-planck equation // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 80. — pp. 214–217.

60. Metzler R., Barkai E., Klafter J. Anomalous diffusion and relaxation close to thermal equilibrium: a fractional Fokker-Planck equation approach // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 82(18). — pp. 3563.
61. Sokolov M., Blumen A., Klafter J. Dynamics of annealed systems under external fields: CTRW and the fractional Fokker-Planck equations // *Europhys. Lett.* — 2001. — Vol. 56(2). — pp. 175.
62. Barenblatt, G., Zheltov, I. and Kochina, I. Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks [strata] // *Journal of Applied Mathematics.* —1960. —vol. 24. — pp. 1286-1303.
63. Gerke H.H. and van Genuchten M.Th. A dual-porosity model for simulating the preferential movement of water and solutes in structured porous media // *Water Resour. Res.* — 1993. — Vol. 29. — No. 2. — pp. 305-319.
64. Šimůnek J. and van Genuchten M. Modeling non equilibrium flow and transport processes using HYDRUS // *Vadose Zone J.* —2008. — vol.7. — no. 2. — pp. 728-797.
65. Goltz N.M. and Roberts P.V. Interpreting organic transport data from a field experiment using physical nonequilibrium models // *J. Contam. Hydrol.* — 1986. — Vol. 1. — pp. 77-93.
66. Carrera J., Sanchez-Vila X., Benet I., Medina A., Galarza, G. and Guimera J. On matrix diffusion formulations, solution methods and qualitative effects // *Hydrogeol. J.* —1998. — Vol. 6. — pp. 178–190.
67. Harvey R. and Gorelick S.M. Multiple-rate mass transfer for modeling diffusion and space reactions in media with pore-scale heterogeneity // *Water Resour. Res.* — 1995. — Vol. 31. — pp. 2383–2400.
68. Dentz M. and Berkowitz B. Transport behavior of a passive solute in continuous time random walks and multirate mass transfer // *Water Resour. Res.* —2003. — Vol. 39. — pp. 1111.
69. Donado L., Sanchez-Vila X., Dentz M., Carrera J. and Bolster D. Multicomponent reactive transport in multi-continuum media // *Water Resour. Res.* — 2009. — Vol.45. — pp. 11402.
70. Dong Ch., Sun S., and Taylor G. Numerical modeling of contaminant transport in fractured porous media using mixed finite-element and finite volume method. // *J. Porous Media.* — 2011. — Vol. 14 — No. 3. — pp. 219–242.
71. Nair V.V. and Thampi S.G. Numerical modeling of contaminant transport in sets of parallel fractures with fracture skin // *J. Porous Media.* — 2012. — Vol. 15. — issue 1. — pp. 95-100.

72. *Prakash P. and Nambi I.M.* Dissolution and Contaminant Transport in Aquifers with Spatially and Temporally Variable Hydraulic Properties // *Spec. Topics Rev. Porous Media: Int. J.* —2012. — vol. **3**. — no. 4. — pp. 353–369.
73. *Матвеев Л. В.*, Перенос примеси в трещиновато-пористой среде с сорбцией // *ЖЭТФ* — 2012. — т. **142** — No. 5. —стр. 943-950.
74. *Matveev L.V.* Anomalous nonequilibrium transport simulations using a model of statistically homogeneous fractured-porous medium // *Physica A.* — 2014. — Vol. 406. — pp. 119-130.
75. *Кондратенко П. С., Матвеев Л. В.*, Асимптотические режимы и структура хвостов концентрации в модели Дыхне // *ЖЭТФ.* — 2007. — т. 131. — Вып. 3. — стр. 494-499.
76. *Masciopinto C. and Passarella G.* Mass-transfer impact on solute mobility in porous media: a new mobile-immobile model // *J. Contam. Hydrol.* – 2018. – Vol. 215. — pp. 21–28.
77. *Muscus N. and Falta R.W.* Semi-analytical method for matrix diffusion in heterogeneous and fractured systems with parent-daughter reactions // *J. Contam. Hydrol.* —2018. — Vol. 218. — pp. 94–109.
78. *Капырин И.В., Сускин В.В., Расторгуев А.В., Никитин К.Д.* Верификация моделей ненасыщенной фильтрации и переноса в зоне аэрации на примере расчетного кода GeRa. // *Вопросы атомной науки и техники, серия «Математическое моделирование физических процессов».* – 2017. – №1 – стр. 60-75.
79. *Кондратенко П. С.* Асимптотический подход к описанию неклассических процессов переноса. Принцип Ферма// *Письма в ЖЭТФ* –2017. – т. 106. — вып.9 – стр.581-584.
80. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Электродинамика сплошных сред // Москва, Физматлит (2005).
81. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика: нерелятивистская теория // Москва, Физматлит (2004).
82. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Механика // Москва, Физматлит (2004).
83. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля // Москва, Физматлит (2004).
84. *Кузнецов В.М., Жуков А.П., Шнеерсон М.Б.* Введение в сейсмическую анизотропию: теория и практика // Тверь, ООО "Издательство ГЕРС" (2006).
85. *Дыхне А.М., Драников И.Л., Кондратенко П.С., Попов А.В.* Субдиффузия в кусочно-однородной среде// *Известия Академии наук. Энергетика* – 2004. –вып. 4– стр. 109-112.
86. *Дыхне А.М., Кондратенко П.С., Матвеев Л.В.* Перенос примеси в перколяционных средах // *Письма в ЖЭТФ* –2004. – т. 80. — вып.6 – стр.464-467.

87. *Румынин В.Г.* Геомиграционные модели в гидрологии // Санкт-Петербург, Наука (2011)
88. *Sahimi M.* Flow phenomena in rocks: from continuum models to fractals, percolation, cellular automata, and simulated annealing // *Rev. Modern Phys.* — 1993. — Vol. 65. — pp. 1393-1534.
89. *Cvetcovic V.* A general memory function for modeling mass transfer in groundwater transport // *Water Resour. Res.* — 2012. — Vol. 48 — pp. 04528.
90. *Dvoretckaya O.A., Kondratenko P.S.* Anomalous transport regimes and asymptotic concentration distributions in the presence of advection and diffusion on a comb structure // *Phys. Rev. E* 79. — 2009. — 041128.
91. *Чукбар К.В.*, Квазидиффузия пассивного скаляра // *ЖЭТФ* —1996. — т.109— No. 4. — стр. 1335-1348

#### ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ ПО ТЕМЕ ДИССЕРТАЦИИ

1. *Кондратенко П.С., Матвеев А.Л.* Классическая адвекция-диффузия в неоднородных средах // *ЖЭТФ* — 2020. — т. 157. — вып. 4. — стр. 703–706
2. *Kondratenko, P.S., Matveev, A.L., Vasiliev, A.D.* Numerical implementation of the asymptotic theory for classical diffusion in heterogeneous media // *Eur. Phys. J. B* — 2021. — Vol. **94**, — 50
3. *Кондратенко П.С., Матвеев А.Л., Обухов Ю.Н.*, Асимптотическая теория анизотропной классической диффузии в неоднородных средах // *ЖЭТФ*. – 2021. – том 159. — вып. 7. — стр.719-723.
4. *Кондратенко П.С., Матвеев А.Л.* Неклассический перенос примеси в модели Дыхне с параметрами, зависящими от координат. Принцип Ферма // *ЖЭТФ*. –2021. – том 159. — вып. 7. – стр. 724-729.
5. *Matveev, A.L., Matveev, L.V.* Impurity transport regimes in fractured-porous medium with widely-spaced adsorbing inclusions // *Special Topics & Reviews in Porous Media: An International Journal*. – 2019. – Vol. 10(6). – p. 555–567.
6. *Матвеев А.Л.* Перенос примеси в трещиновато-пористой среде, содержащей редкие случайные включения, сорбирующие примесь // *Труды 61-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 19-25 ноября 2018 года. Фундаментальная и прикладная физика.* — М.: МФТИ, 2018.— стр. 279.

7. *Кондратенко П.С., Матвеев А.Л.* Аналитические результаты для классической адвекции-диффузии в неоднородных средах// Труды 62-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 18-24 ноября 2019 года. Фундаментальная и прикладная физика. — М.: МФТИ, 2019. – стр. 319.

8. *Кондратенко П.С., Матвеев А.Л., Обухов Ю.Н.* Классическая диффузия в анизотропной среде с крупномасштабными неоднородностями // Труды 64-й Всероссийской научной конференции МФТИ. 29 ноября – 03 декабря 2021. Фундаментальная и прикладная физика. – 2021. — стр.253.