

Введение. Общая физико-математическая постановка и элементарные механизмы массопереноса

В достаточно общем виде миграция нестабильного (подверженного распаду/деструкции) вещества в фильтрационном потоке описывается уравнением конвективной дисперсии

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda n C + W_s + W_d + \mathbf{v} \cdot \nabla C - \nabla \cdot (\mathbf{D}_e \cdot \nabla C) = 0, \quad (\text{B.1})$$

в котором функции источников W_s и W_d ассоциируются, соответственно, с внутрипластовыми физико-химическими взаимодействиями (например, сорбцией) и диффузионными обменными процессами (протекающими, например, на границе между трещинами и породными блоками в трещиновато-пористых породах); здесь C – объемная концентрация вещества в растворе, n – пористость, λ – константа распада (деструкции), \mathbf{v} – скорость фильтрации Дарси, \mathbf{D}_e – коэффициент суммарной эффективной дисперсии/микродисперсии (тензор).

Уравнение (B.1) в большей степени подходит для описания миграции вещества в *пористых относительно однородных породах*, где выполняется предпосылка сплошности фильтрующей среды – репрезентативного ее объема в масштабе рассмотрения процесса.

Массоперенос в водоносных горизонтах, связанных с *трещиноватыми породами*, отличается большей спецификой, связанной, прежде всего, со структурированием («фокусированием») фильтрационного потока в трещинном пространстве. Под этим явлением понимается концентрирование расхода потока воды в ограниченном количестве трещин, образующих проводящие каналы, в то время как основной объем трещинного пространства может оставаться заполненным неподвижной (застойной) водой, а, следовательно, поверхность трещин в застойных зонах оказывается недоступной для сорбируемых загрязняющих веществ в составе растворов, движущихся в проводящих каналах (Tsang, Tsang, 1989). Тем не менее, трудности опытного изучения такого рода эффектов и дефицит исходной информации, не оставляют альтернативы для описания транспортного процесса, кроме как обращение к осредненным моделям конвективно-дисперсионного типа (1B). Они получили название *моделей эквивалентной пористой*

среды (equivalent porous medium – EPM), в которых под коэффициентом n понимается трещиноватость фильтрующего массива.

Коэффициент дисперсии зависит, в общем случае, от скорости фильтрации и складывается из гидродинамической (D_{ij}^d) и молекулярно-диффузионной (D_{em}) компонент (Bear, 1972):

$$D_{eij} = D_{eij}^d + D_{em} \delta_{ij}, \quad (B.2)$$

$$D_{eij}^d = (\delta_L - \delta_T) \frac{v_i v_j}{|\mathbf{v}|} + \delta_T |\mathbf{v}| \delta_{ij}, \quad \delta_{ij} \begin{cases} = 1 \text{ для } i = j \\ = 0 \text{ для } i \neq j \end{cases} \quad (B.3)$$

δ_L и δ_T – продольная и поперечная дисперсивность (коэффициенты, линейно связывающие компоненты гидродинамической дисперсии D_{eij}^d и скорости Дарси v_i/v_j) [L], D_{em} – эффективный коэффициент диффузии [L²T⁻¹], $|\mathbf{v}| = v = (v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)^{1/2}$, δ_{ij} – дельта-функция Кронекера [-], $i, j = 1, 2, 3$.

Например,

$$D_{exx}^d = \frac{(\delta_L - \delta_T)v_x^2 + \delta_T v^2}{v} = \frac{(\delta_L - \delta_T)v_x^2 + \delta_T(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{v} = \delta_L \frac{v_x^2}{v} + \delta_T \frac{v_y^2}{v} + \delta_T \frac{v_z^2}{v}. \quad (B.4a)$$

Аналогично получаем

$$D_{eyy}^d = \delta_L \frac{v_y^2}{v} + \delta_T \frac{v_x^2}{v} + \delta_T \frac{v_z^2}{v}, \quad (B.4б)$$

$$D_{ezz}^d = \delta_L \frac{v_z^2}{v} + \delta_T \frac{v_x^2}{v} + \delta_T \frac{v_y^2}{v}. \quad (B.4в)$$

В одномерном плановом потоке:

$$D_{exx} \equiv D_{eL} = \delta_L v_x + D_{em}, \quad D_{eyy} = D_{ezz} \equiv D_{eT} = \delta_T v_x + D_{em}. \quad (B.5)$$

В одномерном радиальном потоке, создаваемым нагнетательной скважиной:

$$D_{er} = \delta_L v_r + D_{em} = \frac{\delta_L Q}{2\pi m r} + D_{em}, \quad (B.6)$$

где $v_r = Q/2\pi m r$ – радиальная скорость фильтрации Дарси, Q – дебит нагнетания, m – мощность горизонта.

Запись уравнений (B.1) и (B.2) предполагает, что диффузионно-дисперсионный поток на границе раздела взаимовытесняющихся растворов описывается градиентным законом Фика, причем допускается объединение молекулярно-диффузионной и механической (гидродисперсионной) компонент переноса – несмотря на их различную физическую природу. Поэтому уравнения вида (B.1) иногда называют *фиковскими уравнениями*.

Для относительно однородных по гранулометрическому составу пористых пород продольная дисперсивность, δ_L , изменяется от десятых долей до первых сантиметров, что часто позволяет не учитывать продольную дисперсию на фоне конвекции. В трещиноватых породах в зависимости от характерных размеров породных блоков параметр микродисперсии δ_L изменяется в гораздо более широких пределах – от нескольких десятков сантиметров до десятков метров.

Рассеяние вкрест направления фильтрационного потока приводит к формированию объёмных ореолов загрязнения. Поперечная дисперсивность, δ_T , обычно в 10–20 раз ниже, чем значение δ_L для тех же пород. В большинстве случаев отмечается сильная анизотропия рассеивающих свойств водоносных толщ в направлениях, ортогональных направлению конвекции: различия в величинах дисперсивностей δ_{Ty} и δ_{Tz} , характеризующих плановую и профильную поперечную гидродисперсию, могут достигать двух и более порядков (обычно $\delta_{Ty} \gg \delta_{Tz}$), что является следствием естественной стратификации геологических сред. Несмотря на относительно малые значения поперечной дисперсивности в сравнении с продольной, роль поперечного дисперсионного рассеяния вещества может со временем оказаться доминирующей, так как по мере увеличения масштаба переноса растёт, соответственно, боковая поверхность ореола загрязнения, через которую осуществляется поперечная дисперсия.

При переходе от локальных к региональным условиям обычно наблюдается резкий рост определяемых значений δ_L и δ_T , что может быть объяснено неверной физико-математической интерпретацией процесса – недоучетом фильтрационной неоднородности и гетерогенности реальных комплексов горных пород. Эти эффекты также можно учесть, рассматривая миграцию вещества в средах с двойной емкостью – трещиновато-пористых породах (разд. 2) и/или в породах, изменчивость фильтрационных свойств которых описывается в рамках геостатистики (разд. 3).

Микродисперсия в трещиноватых породах и, соответственно, поведение ореолов рассеяния зависит от плотности трещин, статистического распределения их длины и проницаемости, наличия в массиве пород нескольких систем трещин с различной пространственной ориентацией. Определенное сочетание контролирующих характеристик может оказаться таковым, что описание концентрационных распределений в рамках классических дисперсионных представлений (моделей) будет неудовлетворительным. Отклонение концентрационных распределений от дисперсионного вида часто наблюдается при наличии в массиве пород доминирующих систем трещин большой протяженности (Reeves et al., 2008). Распределение фильтрационных потоков между

этими системами и мелкими трещинами имеет весьма сложный характер, слабо влияющих на общий (осредненный) фильтрационный поток, но видоизменяющих характер концентрационных кривых. Отмеченные эффекты стимулируют развитие альтернативных моделей, фильтрации и массопереноса в дискретном трещинном пространстве.

Наиболее изученным и практически значимым для гидрогеологической практики процессом, сопровождающим миграцию, является физическая сорбция вещества горной породой, описываемая линейной изотермой («линейная сорбция»): $N = KC$, где K – коэффициент сорбционного распределения, форма представления которого зависит от типа породы – пористые или трещиноватые (см. разд. 1.1). Если процесс распада (деструкции) вещества протекает и в его адсорбированном состоянии, то

$$W_s = \lambda N + \frac{\partial N}{\partial t} = \lambda KC + K \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (\text{B.7})$$

что позволяет преобразовать уравнение (B.1) к виду

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda RC + \frac{W_d}{n} + \mathbf{u} \cdot \nabla C - \nabla \cdot (\mathbf{D} \cdot \nabla C) = 0, \quad (\text{B.8})$$

наиболее часто встречаемому в гидрогеологической литературе; здесь R – фактор сорбционной задержки,

$$R = 1 + \frac{K}{n}, \quad (\text{B.9})$$

численные значения которого указывают, во сколько раз сорбируемое вещество переносится медленнее, чем инертные (химически пассивные) компоненты (частицы воды). Так, если время миграции инертного компонента (частиц воды) до расчетной точки x составляет $t_w = x/u$, то сорбируемого компонента это время будет

$$t_0 = Rt_w = \frac{Rx}{u}. \quad (\text{B.10})$$

В уравнении (B.8): $\mathbf{u} = \mathbf{v}/n$ – действительная (истинная) скорость фильтрации; $\mathbf{D} = \mathbf{D}_e/n$ – коэффициент поровой дисперсии (микродисперсии). В таком представлении молекулярно-диффузионная составляющая коэффициента поровой диффузии, D_m , связана с эффективным, D_{em} , и кажущимся (*apparent*), D_a , коэффициентом диффузии соотношениями:

$$D_m = \frac{D_e}{n} = RD_a. \quad (\text{B.11})$$

При малых скоростях фильтрации конвекция имеет подчиненное значение, а диффузия становится главным механизмом, определяющим перенос вещества в горных породах.

Аналитические решения большинства рассматриваемых здесь краевых задач миграции представлены в двух математических формах: замкнутой аналитической форме (точные решения), дающей представление о развитии процесса в области привычных (реальных) пространственно-временных координат (например, для одномерного массопереноса – x, t), и в комплексной области изображений искомой функции концентрации по Лапласу (x, p , где p – комплексная переменная). В последнем случае в программном комплексе ANSDIMAT используются численные процедуры перехода из области изображений в реальную область. Последние решения следует отнести к разряду приближенных – численно-аналитических.

Часть I. Одномерная дисперсия

В теории миграции решения уравнений одномерного переноса растворенного вещества в пористых или трещиноватых средах считаются основополагающими для оценки значимости дисперсии концентрационных фронтов, обусловленной гидродисперсионными эффектами и кинетикой распада и/или сорбции в гомогенных породах (разд. 1), диффузионным обменом между трещинами и пористыми блоками в трещиновато-пористых средах (разд. 2), а также флуктуацией поля скоростей фильтрации в гетерогенных горизонтах (разд. 3). Интенсивность миграции контролируется средней скоростью фильтрации (Дарси) в направлении координатной оси x . Флуктуации скорости фильтрации около среднего, имеющие место в статистически неоднородных (гетерогенных) по проницаемости пластах, находят отражение в коэффициенте эффективной продольной макродисперсии (разд. 3).

1. Гомогенные водоносные горизонты

Представленные здесь аналитические решения краевых задач достаточно известны в теории миграции подземных вод. Наиболее полный перечень таких решений, охватывающих различные типы граничных и начальных условий, представлен в работах Ван Генухтена с соавторами (Van Genuchten, 1981; van Genuchten, Alves, 1982). Большинство из них включены в программный комплекс ANSDIMAT. Некоторого расширения этот перечень потребовал применительно к задачам, описывающим концентрационные распределения при импульсном характере концентрационного источника (в виде дельта-функции Дирака), а также задачи кинетической сорбции вещества в фильтрационном потоке.

Рассматриваемые модели миграции включают основные гидродинамические механизмы массопереноса – конвекцию и дисперсию, а также элементарные физико-химические взаимодействия и преобразования – сорбцию и распад вещества (деструкцию). Методы решения этих задач изложены в самом общем виде, основное внимание уделено интегральному преобразованию Лапласа. Соответствующие решения в изображениях по Лапласу, с последующим их обращением в область оригинала с использованием достаточно разработанных численных алгоритмов, позволяет расширить перечень исследуемых проблем геомиграции, в том числе, с использованием программного комплекса ANSDIMAT.

1.1. Исходное уравнение и краевые условия

В достаточно общем виде миграция нестабильного компонента в одномерном плоскопараллельном фильтрационном потоке, формирующемся в однородной в фильтрационном отношении пористой (или трещиноватой – в рамках концепции ЕРМ) среде, описывается следующим уравнением одномерным конвективной дисперсии

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda n C + W_s + v \frac{\partial C}{\partial x} - D_{el} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0, \quad (1.1)$$

в котором функция источника W_s ассоциируются с внутрислоевыми физико-химическими взаимодействиями – сорбцией; здесь C – объемная концентрация вещества в растворе, n – пористость (трещиноватость), λ – константа распада, v – скорость фильтрации Дарси, D_{el} – коэффициент эффективной продольной гидродисперсии,

$$D_{el} = D_{em} + \delta_L v, \quad (1.2)$$

D_{em} – эффективный коэффициент диффузии, δ_L – продольная дисперсивность. Уравнение (1.1) предполагает пренебрежение компонентами дисперсионного переноса, ортогональными вектору средней скорости $v \equiv v_x$ (компонентами поперечной дисперсии).

Приводимые ниже решения описывают миграцию вещества в неограниченной ($-\infty < x < \infty$), полуограниченной ($0 \leq x < \infty$) и ограниченной ($0 \leq x \leq L$) областях.

Начальные условия в большинстве задач предполагаются однородными

$$C = C^0 = \text{const}, \quad t = 0, \quad 0 < x < \infty, \quad (1.3)$$

реже – неоднородными

$$C = C^0(x), \quad t = 0, \quad 0 < x < \infty. \quad (1.3a)$$

К неоднородным начальным условиям можно отнести условия, задаваемые с помощью дельта-функции Дирака $\delta(x)$ на неограниченном отрезке $-\infty < x < \infty$, что отвечает инъекции конечной массы вещества M_0 в начальный момент времени в произвольной точке x при идеальном его перемешивании в сечении площадью S :

$$C(x, 0) = \frac{M_0}{S} \delta(x), \quad -\infty < x < \infty. \quad (1.3b)$$

Традиционно, при решении дифференциального уравнения (1.1) в качестве базовых входных концентрационных сигналов $C(0, t)$ рассматриваются ступенчатая (Хевисайда) $H(t)$ или импульсная $\delta(t)$ (дельта, - Дирака) функции. Соответствующие решения могут быть адаптированы для описания и других форм входных концентрационных сигналов (функций).

К фундаментальным решениям относятся решения, полученные для граничного условия I рода (Дирихле) на входной границе потока, где пренебрегается диффузионной (дисперсионной) компонентой массопереноса,

$$C(0, t) = C_0(t), \quad t > 0, \quad (1.4)$$

например, для ступенчатого входного сигнала

$$C(0, t) = C_0 H(t), \quad t > 0, \quad (1.5)$$

где $H(t)$ – так называемая ступенчатая функция Хэвисайда, записанная для времени.

Наряду с решениями миграционных задач, полученным для ступенчатой функции (1.5), достаточно востребованными в гидрогеологической практике являются решения для импульсного, пакетного и экспоненциально затухающего входных концентрационных сигналов, соответственно,

$$C(0, t) = \frac{M_0}{vS} \delta(t), \quad t > 0, \quad (1.6)$$

$$C(0, t) = \begin{cases} C_0 & 0 \leq t \leq t_n \\ 0 & t > t_n \end{cases}, \quad (1.7)$$

$$C(0, t) = C_0 \exp(-\lambda t), \quad t > 0, \quad (1.8)$$

где M_0 – масса инъецированного вещества [М], S – площадь сечение потока [L^2]; отношение M_0 / Sv – масса инъецируемого вещества, приходящаяся на объемный расход фильтрационного потока в сечении S ; $\delta(t)$ – дельта-функция Дирака [T^{-1}], t_n – продолжительность периода поддержания постоянной концентрации на границе $x = 0$. Вместо константы распада в водоносном горизонте, λ , в (1.8) иногда принимается граничное значение коэффициента, λ_b , отличное от λ .

Для описания миграции в относительно слабопроницаемых породах, где конвективные и диффузионные потоки вещества соизмеримы, может потребоваться привлечение других решений краевых задач (Van Genuchten, 1981; van Genuchten, Alves, 1982; Lindstrom, Voersma, 1989), полученных с учетом более строгого граничного условия III рода:

– при входной концентрации, рассматриваемой в качестве произвольной функции времени (в частном случае, $C_0 = \text{const}$),

$$\left. uC - D_L \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0^+} = uC_0(t); \quad (1.9)$$

– при импульсной входной концентрационной функции

$$\left. uC - D_L \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x=0^+} = \frac{M_0}{Sn} \delta(t). \quad (1.10)$$

Граничное условие II рода обычно свойственно выходной границе потока, которая либо относится в бесконечность

$$\frac{\partial C(\infty, t)}{\partial x} = 0, \quad (1.11)$$

либо приурочена к линейному размеру области миграции, L ,

$$\frac{\partial C(L, t)}{\partial x} = 0. \quad (1.12)$$

Последнее условие предполагает, что на выходной границе потока пренебрегается дисперсионной (диффузионной) компонентой массового потока, например, на выходе из образца породы, участвующего в миграционном эксперименте, имеет место контакт с хорошо перемешиваемым раствором.

1.2. Линейная равновесная сорбция

При описании миграции в пористых породах на основе уравнения (1.1) функция источника имеет представление

$$W_s = \lambda \rho_b S_w + \rho_b \frac{\partial S_w}{\partial t}, \quad (1.13)$$

где S_w – весовая концентрация сорбируемого вещества (его вес, приходящийся на единицу веса породы) [г/г], ρ_b – плотность породы в сухом состоянии [г/см³]. В трещиноватых породах

$$W_s = \lambda S_b S_f + S_b \frac{\partial S_f}{\partial t}, \quad (1.14)$$

где S_f – концентрация на единицу площади поверхности трещин [г/см²], S_b – удельная поверхность трещин (породных блоков) [1/см].

В обобщенном виде

$$W_s = \lambda N + \frac{\partial N}{\partial t}, \quad (1.15)$$

где N – объемная концентрация вещества в породе [г/см³], связанная с S_w и S_f соотношениями $N = \rho_b S_w$ и $N = S_b S_f$.

В случае равновесной сорбции в любой момент времени $S_w = K_d C$ (пористые породы) или $S_f = K_a C$ (трещиноватые породы); K_d (см³/г) и K_a (см) – коэффициенты

сорбционного распределения. Тогда уравнение (1.1) при W_s , определяемом по (1.15), преобразуется к виду

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda RC + u \frac{\partial C}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0, \quad (1.16)$$

где $u = v/n$ – действительная скорость фильтрации, $D_L = D_{eL}/n$ – коэффициент поровой гидродисперсии, R – фактор сорбционной задержки:

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{n} \quad (1.17a)$$

– пористые породы,

$$R = 1 + \frac{K_a S_b}{n} \quad (1.17b)$$

– трещиноватые породы.

1.2.1. Миграция стабильного компонента ($\lambda = 0$)

Уравнение (1.16) принимает вид

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0. \quad (1.18)$$

Решение для пространственно неограниченной области ($-\infty < x < \infty$).

Предположим, что в начальный момент времени ($t = 0$) в точке $x = 0$ существует контакт между жидкостями, различающимися концентрацией некоторой инертной метки: $C = C_0$ при $x < 0$ и $C = 0$ при $x > 0$. Условно можно положить, что при $x = 0$ $C = C_0/2$. Соответствующим образом формализованная запись краевых условий имеет вид:

$$\begin{aligned} C(x, 0) &= C_0 H(-x) \quad -\infty < x < \infty, \\ C(-\infty, t) &= C_0 \quad t > 0, \quad C(+\infty, t) = 0 \quad t > 0, \end{aligned} \quad (1.19)$$

где $H(-x)$ – ступенчатая функция Хэвисайда, записанная для пространственной координаты:

$$H(-x) = 1 \quad x < 0, \quad H(-x) = 1/2 \quad x = 0, \quad H(-x) = 0 \quad x > 0. \quad (1.19a)$$

Рассмотрим процесс в подвижной системе координат

$$x' = x - ut/R, \quad t' = t. \quad (1.20)$$

Тогда производные в уравнении (1.18) можно переопределить, воспользовавшись «цепным правилом» (Румынин, 2011). Эта операция приводит к уравнению диффузионного вида

$$\frac{\partial C}{\partial t'} - D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x'^2} = 0. \quad (1.21)$$

Таким образом, вблизи фронта, движущегося с постоянной скоростью u , имеет место «симметричная» дисперсия, приводящая к рассеиванию вещества как слева ($x' < 0$), так и справа ($x' > 0$) от фронта вытеснения. В силу такой симметрии концентрация на фронте $C = C_0/2$. Фундаментальное решение диффузионного уравнения (1.21) при условии $C(x'=0, t) = C_0/2$ хорошо известно:

$$C(x', t') = \frac{C_0}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{x'}{\sqrt{4D_L t' / R}} \right). \quad (1.22)$$

Переходя обратно к исходной системе координат (x, t) , окончательно получаем

$$\bar{C} = \frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\xi). \quad (1.23)$$

здесь
$$\xi = \frac{Rx - ut}{\sqrt{4RD_L t}}; \quad (1.23a)$$

$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} \exp(-z'^2) dz'$ – дополнительный интеграл вероятностей, $\operatorname{erfc}(z) = 1 - \operatorname{erf}(z)$;

$\operatorname{erf}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^z \exp(-z'^2) dz'$ – интеграл вероятностей (функция ошибок).

Приведем основные свойства функции $\operatorname{erfc}(z)$, табличные значения которой можно найти в специализированных математических изданиях (Абрамовиц, Стиган, 1979) и гидрогеологической учебной литературе (Шестаков, 1995; Мироненко, 1996):

$$\operatorname{erfc}(-z) = 2 - \operatorname{erfc}(z), \operatorname{erfc}(0) = 1, \operatorname{erfc}(\infty) = 0, \operatorname{erfc}(-\infty) = 2. \quad (1.24)$$

На самом деле, симметрия (относительно пространственной координаты $x_0 = ut/R$) концентрационного распределения нарушается за счет дисперсии вещества через границу раздела в начальный момент времени $t = 0$, что может быть отражено в краевых условиях (Leij, Toride, 1995):

$$C(x, 0) = C_0 H(-x) \left[1 + \frac{2D_L}{u} \delta(x) \right] \quad -\infty < x < \infty, \quad (1.25a)$$

$$C(-\infty, t) = C_0, \quad t > 0; \quad C(+\infty, t) = 0, \quad t > 0; \quad (1.25b)$$

здесь $\delta(x)$ – дельта-функция. В такой постановке решение задачи имеет вид:

$$\bar{C} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc}(\xi) + \sqrt{\frac{RD_L}{\pi u^2 t}} e^{-\xi^2} \right], \quad (1.25b)$$

где комплексный аргумент $\xi = \xi(x, t)$ определяется согласно (1.23а).

В ряде случаев полезным для анализа миграционных процессов является решение, полученное для неограниченной области ($-\infty < x < \infty$) при задании начального условия в виде дельта-функции Дирака, $\delta(x)$ (1.36)

$$C_i = \frac{M_0}{Sn\sqrt{4\pi D_L Rt}} \exp\left[-\frac{(Rx - ut)^2}{4RD_L t}\right]. \quad (1.26)$$

Решение для полуограниченной области ($0 \leq x < \infty$). Рассмотрим задачу одномерного массопереноса (1.18) при условии постоянства концентрации $C = C_0$ на входной границе потока ($x = 0$), – граничное условие I рода:

$$C(x, 0) = 0 \quad 0 < x < \infty, \quad (1.27a)$$

$$C(0, t) = C_0 H(t) \quad t > 0, \quad (1.27б)$$

$$\partial C(+\infty, t) / \partial x = 0, \quad (11.27в)$$

где $H(t)$ – ступенчатая функция Хэвисайда, записанная для временной координаты.

В этом случае решение задачи может быть получено в интегральной форме (Lapidus, Amundson, 1952; Ogata, Banks, 1961):

$$\bar{C} = \frac{C(x, t)}{C_0} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{4\varepsilon} \left[\int_0^\infty \exp(-\lambda^2 - \frac{\varepsilon^2}{\lambda^2}) d\lambda - \int_0^\alpha \exp(-\lambda^2 - \frac{\varepsilon^2}{\lambda^2}) d\lambda \right], \quad (1.28)$$

где $\varepsilon = \frac{ux}{4D_L}$, $\alpha = \frac{x}{2\sqrt{D_L t / R}}$ (верхний предел интегрирования во втором интегральном

выражении). С деталями поиска решения (1.28) можно познакомиться в работе (Румынин, 2011). Интегральные функции, входящие в выражение (1.28), допускают дальнейшие преобразования, так что в «замкнутой» аналитической форме имеем (Ogata, Banks, 1961):

$$\bar{C} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc}\left(\alpha - \frac{\varepsilon}{\alpha}\right) + e^{4\varepsilon} \operatorname{erfc}\left(\alpha + \frac{\varepsilon}{\alpha}\right) \right]; \quad (1.29)$$

это решение известно как *фундаментальное решение* одномерного уравнения конвективной дисперсии в гомогенной среде. Чаще, однако, это решение дается в форме

$$\bar{C} = \frac{1}{2} [\operatorname{erfc}(\xi) + e^{\operatorname{Pe}} \operatorname{erfc}(\xi')], \quad (1.30)$$

$$\xi = \frac{Rx - ut}{\sqrt{4RD_L t}}, \quad \xi' = \frac{Rx + ut}{\sqrt{4RD_L t}}, \quad \operatorname{Pe} = \frac{ux}{D_L}. \quad (1.30a)$$

Его анализ показывает, что при $\operatorname{Pe} = 4\varepsilon > 50$ результаты расчетов, выполняемые на его основе, практически совпадают с приближенным решением (1.23), т.е.

$$\bar{C} \approx \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left(\alpha - \frac{\varepsilon}{\alpha}\right) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\xi). \quad (1.31)$$

Таким образом, с формальных позиций, второе слагаемое в решении (1.98) может рассматриваться как поправка, обеспечивающая выполнение граничного условия первого рода (при $x=0$) для решения задачи (1.88) в среде неограниченной протяженности ($-\infty \leq x \leq \infty$).

На основании формулы (1.31) получаем уравнение движения для любой изолинии с концентрацией \bar{C} вблизи фронта переноса:

$$x_{\bar{C}} = \frac{ut}{R} \pm 2|\xi| \sqrt{\frac{D_L t}{R}}, \quad (1.32)$$

где функция $\xi = \operatorname{inerfc}(2\bar{C})$ (см. (1.23)); знак «минус» – для концентрации $\bar{C} > 0.5$, знак «плюс» – для концентрации $\bar{C} < 0.5$.

Решение уравнения (1.18) при краевых условиях (1.27) может быть также получено операционным методом с использованием *интегрального преобразования Лапласа*. Поскольку далее в настоящей работе мы неоднократно будем пользоваться данным методом решения краевых задач, остановимся кратко на сути этого метода и проиллюстрируем особенности его приложения к рассматриваемой здесь проблеме.

Интегральное (одностороннее) преобразование Лапласа

$$\tilde{C} = \tilde{C}(p) = \int_0^{\infty} C(t) \exp(-pt) dt \quad (1.33)$$

ставит соответствие каждой однозначной функции (оригиналу) $C(t)$ (t – действительная переменная, время) единственную функцию $\tilde{C}(p)$ (изображение) комплексной переменной $p = \sigma \pm i\alpha$.

Преобразование Лапласа при решении задач массопереноса позволяет избавиться от частной производной по времени, что приводит к обыкновенным дифференциальным уравнениям, решаемым стандартными методами. Возможно также последовательное преобразование исходных уравнений по двум независимым переменным t и x . Решения в изображениях для различных входных ($x=0$) концентрационных функций имеют подобные аналитические выражения, различающиеся видом множителя при однотипных «ядрах» решений – функций отклика, не зависящих от граничных условий. Это существенно упрощает процедуры поиска обобщенных решений и аналитический переход от одного типа граничных условий к другому.

После решения краевой задачи в изображениях переход к оригиналу осуществляется в общем случае по формуле:

$$C(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} \tilde{C}(p) \exp(pt) dp; \quad (1.34)$$

здесь σ – положительная константа, $i = \sqrt{-1}$, т.е. обратный переход в область оригинала предполагает контурное интегрирование в комплексной плоскости (Диткин, Прудников, 1975; Govindaraju, Das, 2007).

Для целого ряда функций существуют «готовые» (табличные) аналитические выражения, позволяющие осуществлять прямые и обратные переходы при поиске решений с использованием данного операционного метода (см., например, Диткин, Прудников, 1961, 1975; Деч, 1965; Бейтмен, Эрдейи, 1969; Абрамовиц, Стиган, 1979; van Genuchten, Alves, 1982).

Достаточно разработанными являются также численные методы обратного перехода от решений в изображений по Лапласу к оригиналам искомым функций (Stehfest, 1970; Talbot, 1979), Для этого существуют «стандартные» программы в прикладных математических программных пакетах, таких как *Mathematica*, *MathCad*, *MathSoft* и *Maple*. В программном комплексе ANSDIMAT используется алгоритм Стехфеста (Stehfest, 1970).

В изображениях по Лапласу (1.33) исходное уравнение (1.18) при нулевом начальном условии (1.27а) принимает форму обыкновенного однородного дифференциального уравнения второго порядка:

$$D_L \frac{d^2 \tilde{C}}{dx^2} - u \frac{d\tilde{C}}{dx} = pR\tilde{C}, \quad \tilde{C} = \tilde{C}(x, p), \quad (1.35)$$

или в безразмерной форме

$$\frac{d^2 \tilde{C}}{d\eta^2} - 2a \frac{d\tilde{C}}{d\eta} - R\tilde{C} = 0, \quad (1.35a)$$

где $\eta = \frac{x}{\sqrt{D_L/R}}$, $a = \frac{u}{2\sqrt{RD_L}}$ ($a\eta = \frac{Pe}{2}$).

Общее решение уравнения (1.35а) имеет вид

$$\tilde{C} = A \exp(a\eta) \exp(-\eta\sqrt{p+a^2}) + B \exp(a\eta) \exp(\eta\sqrt{p+a^2}), \quad (1.36)$$

где A и B – параметрические (не зависящие от x) функции, определяемые типом условий на границах области.

Так, для условий фундаментальной задачи граничные условия (1.27б) и (1.27в) трансформируются к виду:

$$\tilde{C}(0, p) = \frac{C_0}{p}, \quad (1.36a)$$

$$d\tilde{C}(+\infty, p)/dx = 0. \quad (1.36b)$$

Граничное условие (1.36б) удовлетворяется только в том случае, если $B = 0$, т.е.

$$\tilde{C} = A \exp(a\eta) \exp\left(-\eta\sqrt{p+a^2}\right). \quad (1.37)$$

Далее, приравнявая η к нулю с учетом условия (1.36а) на входной границе, получаем $A = C_0 / p$. Таким образом, окончательное решение задачи в изображениях по Лапласу принимает вид:

$$\tilde{C} = \frac{C_0}{p} \exp\left(-\eta(\sqrt{p+a^2} - a)\right). \quad (1.38)$$

Для обращения (1.38) можно использовать несколько подходов, основанных на известных соотношениях и правилах операционного исчисления (Диткин, Прудников, 1961; Деч, 1965; Бейтмен, Эрдейи, 1969; Баренблатт и др., 1972; Govindaraju, Das, 2007). Это приводит к фундаментальному решению (1.30).

Для импульсного сигнала (1.6), по аналогии со ступенчатым сигналом, получаем $A = M_0 / vS$, так что обращение формулы (1.37) дает (Lenda, Zuber, 1970; Zuber, 1974; Leij, Toride, 1995):

$$C_i = \frac{M_0 R}{vS \sqrt{4\pi R D_L t}} \frac{x}{t} \exp\left[-\frac{(Rx-ut)^2}{4R D_L t}\right]. \quad (1.39)$$

В изображениях решения для концентраций C и C_i связаны соотношением

$$\frac{\tilde{C}}{C_0} = \frac{1}{p} \frac{vS}{M_0} \tilde{C}_i, \quad (1.40)$$

откуда, используя теорему свертки (Деч, 1965), получаем

$$\frac{C}{C_0} = \frac{vS}{M_0} \int_0^t C_i dt. \quad (1.40a)$$

Другая форма записи, вытекающая из (1.40),

$$\bar{C}_i = \frac{Sxn}{M_0} C_i = \frac{d\bar{C}}{d\bar{t}}, \quad (1.41)$$

т.е. концентрация \bar{C}_i является производной функции \bar{C} по времени, $\bar{t} = t/t_w$, $t_w = x/u$.

Легко убедиться, что интегрирование функции (1.39) приводит к фундаментальному решению (1.30). Заметим также, что относительная концентрация \bar{C}_i является отношением текущей концентрации C_i к концентрации $C_0 = M_0 / V$, где $V = Sxn$ – объем порового пространства породы между сечением поступления (мгновенной инъекции) вещества в пласт и точкой наблюдения x .

Для пакетного входного сигнала (1.7) коэффициент A в уравнении (1.37) определяется, соответственно, следующими выражениями:

$$A = \frac{C_0}{p} [1 - \exp(-t_n p)]. \quad (1.42)$$

Подстановка (1.42) в операционное решение (1.37) позволяет использовать теорему о сдвиге (Деч, 1965), согласно которой искомое решение для пакета является суперпозицией базовых функций фундаментального решения (1.30):

$$C_n(x, t) = \begin{cases} C(x, t) & \text{при } t \leq t_n, \\ C(x, t) - C(x, t - t_n) & \text{при } t > t_n. \end{cases} \quad (1.43)$$

Для экспоненциально затухающего входного сигнала (1.8, $\lambda \equiv \lambda_b$, где λ_b - константа, показывающая убыль концентрации в растворе, поступающем в пласт, в то время как в самом пласте распад отсутствует) коэффициент A в уравнении (1.37) определяется равенством:

$$A = \frac{C_0}{p + \lambda_b}. \quad (1.44)$$

Обращение формулы (1.37) имеет вид

$$\bar{C} = e^{-\lambda_b t} \left\{ \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(u - \mu_b)x}{2D_L}\right] \operatorname{erfc}(\xi) + \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(u + \mu_b)x}{2D_L}\right] \operatorname{erfc}(\xi') \right\}, \quad (1.45)$$

$$\xi = \frac{Rx - \mu_b t}{\sqrt{4RD_L t}}, \quad \xi' = \frac{Rx + \mu_b t}{\sqrt{4RD_L t}}, \quad \mu_b = \sqrt{u^2 - 4\lambda_b RD_L}. \quad (1.45a)$$

Таким образом, мы видим, что ядро операционного решения (1.37), определяемое двумя экспоненциальными множителями в его правой части, является функцией отклика (на возмущение любой формы) при описании одномерной микродисперсии в полуограниченной области. Параметрическая функция A – отклик на граничное условие.

Для граничного условия III рода на входной границе потока, где пренебрегается диффузионной (дисперсионной) компонентой массопереноса (1.9, $C_0 = \text{const}$), решение в изображениях сохраняет форму (1.37) при

$$A = \frac{C_0}{p} \frac{2a}{a + \sqrt{p + a^2}} \equiv \frac{C_0}{p} \frac{2}{1 + \sqrt{1 + 4RD_L p / u^2}}. \quad (1.46)$$

Обращение формулы (1.37) приводит к решению (Brenner, 1962; Leij, Toride, 1995):

$$\bar{C} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc}(\xi) + \sqrt{\frac{4\text{Pe}\bar{t}}{\pi}} e^{-\xi^2} - [1 + \text{Pe}(1 + \bar{t})] e^{\text{Pe}} \operatorname{erfc}(\xi') \right\}, \quad (1.47)$$

где ξ и ξ' определяются согласно (1.30a).

Анализ решения (1.47) показывает, что достижение максимальной концентрации $\bar{C} = 1$ на входной границе ($x \rightarrow 0$) происходит не мгновенно и зависит от безразмерного комплекса $\text{Pe}\bar{t} = u^2 t / D_L$ (Gershon, Nir, 1969; Миронено и др., 1980; van Genuchten, Alves,

1982). Физически такое постепенное нарастание концентрации можно объяснить тем, что в первые моменты времени (ориентировочно, пока $t < 10D_L/u^2$) диффузионный член за счет большого градиента концентрации вблизи границы соизмерим с конвективным или даже превышает его.

Решение для импульсного входного сигнала при реализации граничного условия III рода (1.10) имеет вид (Perez Guerrero et al., 2013):

$$C_i = \frac{M_0}{SRn} \left\{ \frac{R}{\sqrt{\pi RD_L t}} \exp\left[-\frac{(Rx-ut)^2}{4RD_L t}\right] - \frac{u}{2D_L} \exp\left(\frac{ux}{D_L}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx+ut}{2\sqrt{RD_L t}}\right) \right\}. \quad (1.48)$$

Миграция в пористой среде ограниченной протяженности. Математическая формализация процесса, протекающего на коротком отрезке $0 \leq x \leq L$ (ориентировочно, когда характерное число $Pe = uL/D_L < 10$), предполагает задание условия II рода и на выходной границе ($x = L$) потока (1.12) (van Genuchten, Alves, 1982).

$$\begin{aligned} \bar{C} = & \frac{1}{2} \operatorname{erfc}(\xi) + \frac{1}{2} e^{Pe} \operatorname{erfc}(\xi') + \\ & + \frac{1}{2} \left[2 + \frac{u(2L-x)}{D_L} + \frac{u^2 t}{RD_L} \right] \exp(uL/D_L) \operatorname{erfc}\left[\frac{R(2L-x)+ut}{\sqrt{4RD_L t}} \right] - \\ & - \left(\frac{u^2 t}{\pi RD} \right)^{1/2} \exp\left[\frac{uL}{D_L} - \frac{R}{4D_L t} \left(2L - x + \frac{ut}{R} \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (1.49)$$

$$\xi = \frac{Rx-ut}{\sqrt{4RD_L t}}, \quad \xi' = \frac{Rx+ut}{\sqrt{4RD_L t}}, \quad Pe = \frac{uL}{D_L}. \quad (1.49a)$$

Решение миграционных задач может потребовать также отражения в исходной их постановке неоднородных (непостоянных) краевых условий (1.4), (1.9) и (1.3a). В этом случае, учитывая линейный характер исходного уравнения (1.1) и краевых условий (относительно функции концентрации C), построение расчетных моделей может основываться на принципе суперпозиции частных решений (Lindstrom, Voersma, 1989). Например, определяя из условия $\eta = 0$ в (1.37) коэффициент $A = \tilde{C}_0(p)$, решение уравнения (1.1) при переменной граничной концентрации в области изображений можно записать в форме

$$\tilde{C}^1 = \tilde{C}_0(p) \exp\left(\frac{ux}{2D'_L}\right) \exp\left(-\frac{ux}{2D_L} \sqrt{1 + \frac{4RD_L}{u^2} p}\right). \quad (1.50)$$

Используя теорему об интегральной свертке, получаем оригинал решения (1.53)

$$C^1(x,t) = \int_0^t C_0(t-\tau) C(x,\tau) d\tau, \quad (1.51)$$

или

$$\bar{C}^1 = \int_0^t \bar{C}_0(t-\tau) \frac{Rx}{2\sqrt{\pi D_L R \tau^3}} \exp\left[-\frac{(Rx-ut)^2}{4RD_L \tau}\right] d\tau. \quad (1.52)$$

– см. (1.39).

Интеграл свертка (1.51) позволяет исследовать разнообразные одномерные миграционные задачи, характеризующиеся неоднородными граничными условиями.

1.2.2. Линейная сорбция неустойчивого компонента ($\lambda > 0$)

Приближенное решение одномерного уравнения конвективной дисперсии с учетом распада (1.1) в неограниченной среде $-\infty \leq x \leq \infty$ может быть получено после его преобразования к «диффузионному» виду

$$\frac{\partial w}{\partial t'} - D_L \frac{\partial^2 w}{\partial x'^2} = 0, \quad (1.53)$$

что достигается трансформацией координатной системы в соответствии с (1.20) и заменой переменной $w = Ce^{\lambda t}$. Решение этого уравнения и переход к функции концентрации приводит к выражению

$$\bar{C} = \frac{1}{2} e^{-\lambda t} \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx-ut}{\sqrt{4RD_L t}}\right). \quad (1.54)$$

Однако в силу физической постановки задачи, рассматривающей процесс на отрезке $-\infty \leq x \leq \infty$, формула (1.54) справедлива только в случае «затухающего» концентрационного источника, в котором концентрация вещества во времени падает (вариант «не возобновляющегося» загрязнения), подчиняясь тому же экспоненциальному закону.

Для импульсного источника в неограниченном пласте (1.3б)

$$C_i = \frac{M_0}{Sn\sqrt{4\pi D_L R t}} \exp\left[-\frac{(Rx-ut)^2}{4RD_L t} - \lambda t\right]. \quad (1.54a)$$

В общем случае условия I рода на входной границе потока (1.5) для решения задачи можно воспользоваться операционным методом. В изображениях по Лапласу решение задачи имеет вид, подобный формуле (1.38)

$$\tilde{C} = \frac{C_0}{p} \exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right) \exp\left(-\frac{ux}{2D_L} \sqrt{1 + \frac{4RD_L}{u^2}(\lambda + p)}\right). \quad (1.55)$$

Обращение формулы (1.55) в действительную область приводит к следующему решению задачи (Ogata, 1970; Van Genuchten, 1981):

$$\bar{C} = \frac{1}{2} \exp\left[\frac{x(u - \mu)}{2D_L}\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx - \mu t}{\sqrt{4RD_L t}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left[\frac{x(u + \mu)}{2D_L}\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx + \mu t}{\sqrt{4RD_L t}}\right), \quad (1.56)$$

где $\mu = \sqrt{u^2 + 4\lambda RD_L}$. При $\lambda RD_L / u^2 < 0.05$ влиянием дисперсии можно пренебречь, что позволяет в расчетах использовать ранее приведенные зависимости. При $t \rightarrow \infty$ решение (1.56) имеет стационарную асимптотику:

$$\bar{C} = \exp\left[\frac{x(u - \mu)}{2D_L}\right]. \quad (1.57)$$

В случае падения концентрации на границе $x = 0$ по экспоненциальному закону (1.8) решение в изображениях принимает вид

$$\tilde{C} = \frac{C_0}{p + \lambda} \exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right) \exp\left(-\frac{ux}{2D_L} \sqrt{1 + \frac{4RD_L}{u^2}(\lambda + p)}\right), \quad (1.58)$$

а его обращение в область оригинала приводит к решению

$$\bar{C} = \frac{1}{2} e^{-\lambda t} [\operatorname{erfc}(\xi) + e^{Pe} \operatorname{erfc}(\xi')], \quad (1.59)$$

что отвечает концентрационной функции \bar{C} (1.30), умноженной на экспоненту ($e^{-\lambda t}$).

Если дисперсией в одномерном фильтрационном потоке можно пренебречь ($D_L = 0$), то исходное уравнение трансформируется к виду

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda RC + u \frac{\partial C}{\partial x} = 0. \quad (1.60)$$

Этому дифференциальному уравнению отвечает характеристическая система обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\frac{dt}{R} = \frac{dx}{u} = -\frac{dC}{\lambda C}, \quad (1.61)$$

решение которой имеет вид:

$$C = \begin{cases} C_0 e^{-\lambda t} & \text{при } t \geq \frac{Rx}{u}, \\ C_0 e^{-\lambda Rx/u} & \text{при } x < ut/R. \end{cases} \quad (1.62)$$

В соответствии с этим решением, за фронтом переноса концентрация остается постоянной в течение всего периода миграции. На фронте поршневого вытеснения в расчетный момент времени t значение относительной концентрации $C = C_0 e^{-\lambda t}$, откуда следует, что при $t > (2-3)/\lambda$ концентрация на фронте вытеснения близка к фоновой: наступает стационарный режим переноса, при котором границы ореола остаются стабильными весьма длительное время (при постоянной входной концентрации) — см. рис. 1.1а.

При «затухающем» характере входного концентрационного сигнала искомое решение имеет вид:

$$C|_{\lambda>0} = e^{-\lambda t} C|_{\lambda=0}, \quad (1.63)$$

т.е. оно получается путем умножения функции $C|_{\lambda=0}$, отвечающей случаю поршневого вытеснения, на «фактор распада» – временную функцию $e^{-\lambda t}$:

$$C = \begin{cases} C_0 e^{-\lambda t} & \text{при } t \geq t_0 = \frac{xR}{u}, \\ 0 & \text{при } t < \frac{xR}{u}. \end{cases} \quad (1.64)$$

Как следует из этого решения, концентрация вещества во всей области $x < ut/R$ имеет одинаковое значение (рис. 1.1б).

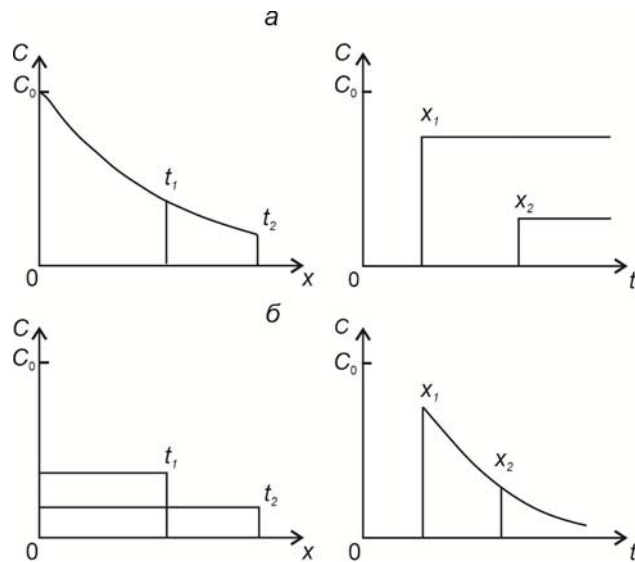


Рис. 1.1. Характерные графики распределения $C(x, t)$ компонента, подверженного распаду.

а и б отвечают различным граничным условиям: а – $C(0, t) = C_0$, б – $C(0, t) = C_0 \exp(-\lambda t)$.

Базовые решения для импульсного входного сигнала в форме дельта-функции Дирака (полуограниченный водоносный горизонт, $0 \leq x < \infty$) для двух типов граничных условий для условий имеют вид (Perez Guerrero et al., 2013):

– I род на границе $x = 0$:

$$C_i = \frac{M_0 R}{vS \sqrt{4\pi R D_L t}} \frac{x}{t} \exp \left[-\frac{(Rx - ut)^2}{4R D_L t} - \lambda t \right]; \quad (1.65)$$

– III род на границе $x = 0$:

$$C_i = \frac{M_0}{SRn} \left\{ \frac{R}{\sqrt{\pi RD_L t}} \exp \left[-\frac{(Rx - ut)^2}{4RD_L t} - \lambda t \right] - \frac{u}{2D_L R} \exp \left(\frac{ux}{D_L} - \lambda t \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{Rx + ut}{2\sqrt{RD_L t}} \right) \right\}. \quad (1.66)$$

1.3. Нелинейная равновесная сорбция для нестабильного компонента (асимптотическое решение задачи поршневого вытеснения)

Пренебрежение гидродисперсией и кинетикой установления сорбционного равновесия позволяет представить исходное дифференциальное уравнение (1.1) при W_s , определяемом (1.15), в виде

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda n C + \lambda N + \frac{\partial N}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = 0. \quad (1.67)$$

Как видно из этой записи, предполагается, что перенос нестабильного компонента ($\lambda > 0$) сопровождается его распадом, протекающим, как в жидкой, так и в твердой фазе. Решение задачи сводится к нахождению скорости смещения концентрационного фронта $x = x^*(t)$, а также к нахождению уравнения концентрационной функции $C = C(x, t)$ (в интервале $0 \leq x \leq x^*$).

Пусть компонент, переносимый потоком подземных вод, сорбируется породой, подчиняясь изотерме Фрейндлиха:

$$f(C) = K_F C^{n^s}. \quad (1.68)$$

Сначала решим вспомогательную задачу для стационарного концентрационного распределения ($t \rightarrow \infty$). При выполнении условия стационарности $\partial C / \partial t = 0$ и $\partial N / \partial t = 0$ уравнение (1.67) трансформируется к виду

$$\frac{dC}{dx} + \frac{\lambda}{u} C + \frac{\lambda K_F^s}{un} C^{n^s} = 0, \quad (1.69)$$

или для относительной концентрации ($\bar{C} = C / C_0$)

$$\frac{d\bar{C}}{dx} + \frac{\lambda}{u} \bar{C} + \frac{\lambda}{u} (R-1) \bar{C}^{n^s} = 0, \quad (1.70)$$

где $R = 1 + K_F^s C_0^{n^s - 1} / n$ – фактор сорбционной задержки (являющийся функцией граничной концентрации C_0). Решение уравнения (1.70) получено в работе (Румынин, 2011)

$$\bar{C} = e^{-\lambda x / u} \left[1 + (R-1) \left(1 - e^{\lambda(1-n^s)x/u} \right) \right]^{1/(1-n^s)}. \quad (1.71)$$

Как нетрудно убедиться, функция $\bar{C} = \bar{C}(x)$ немонотонна: на отрезке $0 \leq x < x^0$ она является убывающей, а при $x > x^0$ – возрастающей; в точке $x = x^0$ концентрация $\bar{C} = 0$. Поэтому решение (1.71) справедливо в области:

$$x \leq x^0 = \frac{1}{1-n^s} \frac{u}{\lambda} \ln\left(\frac{R}{R-1}\right). \quad (1.72)$$

Физический смысл этого неравенства очевиден: стационарная концентрационная волна не может распространяться на расстояние, превышающее некоторое критическое значение x^0 в силу «исчезновения» вещества из системы при его необратимом распаде.

При $n^s = 1$ решение (1.71) вырождается в ранее полученное решение (1.62) которое описывает миграцию нестабильного компонента при линейной адсорбции, когда $R = 1 + K_d \rho_b / n$ ($K_F^s = K_d \rho_b$).

Для построения расчетной модели, описывающей смещение передового фронта концентрационной волны $x^*(t)$, будем исходить из гипотезы (Bosma, van der Zee, 1993), что за ее фронтом $x < x^*$ достаточно быстро, теоретически мгновенно, устанавливается стационарное распределение (1.71): достигается максимально возможная концентрация. Тогда уравнение движения фронта принимает трансцендентный вид:

$$x^* = \frac{ut}{\langle R(x^*) \rangle}, \quad (1.73)$$

где $\langle R(x^*) \rangle$ – среднее значение фактора задержки в интервале $0 \leq x \leq x^*$,

$$\langle R(x^*) \rangle = \frac{1}{x^*} \int_0^{x^*} R(\xi) d\xi, \quad (1.74)$$

причем, в соответствии с принятой гипотезой, для изотермы Фрейндлиха имеем

$$R(\xi) = f[R(C_0^*)] = 1 + \frac{K_F^s}{n} [C_0^*(\xi)]^{n^s-1}; \quad (1.75)$$

здесь C_0^* – стационарное распределение (1.71): $C_0^* = \bar{C} C_0$. Подставляя (1.71) в (1.75), получаем выражение:

$$R(\xi) = 1 - \frac{1}{1 - \bar{R} \exp(-a\xi)}, \quad \bar{R} = \frac{R}{R-1}, \quad a = (1-n^s) \frac{\lambda}{u}. \quad (1.76)$$

Таким образом

$$\langle R(x^*) \rangle = \frac{1}{x^*} \int_0^{x^*} \left[1 - \frac{1}{1 - \bar{R} \exp(-a\xi)} \right] d\xi = -\frac{1}{ax^*} \ln \left| 1 - R(1 - e^{-ax^*}) \right|. \quad (1.77)$$

После подстановки (1.77) в (1.73) и некоторых дополнительных преобразований находим выражение для координаты x^* в явном виде:

$$x^* = x^*(t) = -\frac{u}{(1-n^s)\lambda} \ln \left(1 - \frac{1}{R} \left(1 - e^{-(1-n^s)\lambda t} \right) \right). \quad (1.78)$$

При $t \rightarrow \infty$ $x^* = x^0$, т.е. координата x^0 (1.72) ограничивает зону максимально возможного концентрационного возмущения при миграции в пласте нестабильного компонента, нелинейно адсорбируемого породой.

Из зависимости (1.88) при $\lambda t \rightarrow 0$ следует известный предел для определения положения фронта поршневого вытеснения стабильного компонента, сорбция которого описывается нелинейной изотермой (1.68):

$$x^*(t) = \frac{ut}{R}, \quad R = 1 + \frac{K_F^s C_0^{n^s-1}}{n}. \quad (1.79)$$

1.4. Неравновесная сорбция нестабильного компонента

Уравнение конвективной дисперсии (1.1) при неравновесной (кинетической) сорбции нестабильного компонента, определяемой функцией-источником (1.13), принимает вид,

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda n C + \lambda \rho_b S_w + \rho_b \frac{\partial S_w}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0. \quad (1.80)$$

Уравнение кинетики сорбции, относящейся к химической реакции первого порядка, имеет вид

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \alpha(f(C) - S_w) - \lambda S_w, \quad (1.81)$$

где α – коэффициент скорости кинетики сорбции, $f(C)$ функция, определяющая вид изотермы сорбции. Линейной изотерме сорбции в пористой среде отвечает функциональная зависимость

$$f(C) = K_d \rho_b C, \quad (1.81a)$$

K_d – коэффициент сорбционного распределения.

Поскольку весовая, S_w , и объемная (на единицу объема породы), N , концентрации связаны соотношением $N = \rho_b S_w$ (ρ_b – плотность породы), то система уравнений (1.80), (1.81) может быть переписана в виде

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda n C + \lambda N + \frac{\partial N}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0, \quad (1.82)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \alpha(K_d C - N) - \lambda N, \quad (1.83)$$

где $K_\Gamma = K_d \rho_b$. При $\alpha \rightarrow \infty$ уравнение (1.82) принимает вид (1.16), что отвечает равновесной сорбции, контролируемой фактором сорбционной задержки R .

1.4.1. Частные решения при поршневом вытеснении

Поршневое (фронтальное, $D_L = 0$) движение стабильного ($\lambda = 0$) компонента в пористой среде, как следует из (1.80), описывается системой уравнений

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t} + v \frac{\partial C}{\partial x} = 0, \quad (1.84)$$

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \alpha(K_\Gamma C - N), \quad (1.85)$$

относящейся в подземной гидродинамике к разряду фундаментальных. В подвижных координатах

$$t' = t - t_w, \quad x' = x, \quad t_w = \frac{x}{u}, \quad (1.86)$$

система уравнений (1.84)–(1.85) сводится к следующему безразмерному виду:

$$-\frac{\partial \bar{C}}{\partial \eta} = \bar{C} - \bar{N}, \quad (1.87)$$

$$\frac{\partial \bar{N}}{\partial \tau} = \bar{C} - \bar{N}, \quad (1.88)$$

где $\bar{C} = C/C_0$, $\bar{N} = N/K_\Gamma C_0$, $\eta = \sigma \alpha t_w$, $\tau = \alpha(t - t_w)$, $\sigma = K_\Gamma/n$, $K_\Gamma = K_d \rho_b$, C_0 – граничная концентрация.

Система (1.87), (1.88) удовлетворяет условиям (Furnas, 1930):

$$\bar{C} = (U + V) \exp(-\eta - \tau), \quad (1.89)$$

$$\bar{N} = (U - V) \exp(-\eta - \tau), \quad (1.90)$$

$$V = \frac{1}{2} I_0(2\sqrt{\eta\tau}), \quad (1.91)$$

где $I_0(\cdot)$ – модифицированная функция Бесселя 1-го рода 0-го порядка. Отсюда

$$\bar{C} - \bar{N} = 2V \exp(-\eta - \tau) = I_0(2\sqrt{\eta\tau}) \exp(-\eta - \tau). \quad (1.92)$$

Подстановка последнего равенства в (1.87) и его интегрирование в пределах $[1, \bar{C}]$ и $[0, \eta]$ приводит к решению:

$$\bar{C}(\eta, \tau) = 1 - e^{-\tau} \int_0^\eta e^{-z} I_0(2\sqrt{z\tau}) dz, \quad (1.93)$$

здесь $\tau = \alpha(t - t_0) \geq 0$.

Правую часть равенства (1.93) отождествляют с интегральной функцией Гольдштейна $J(\eta, \tau)$ (Goldshtein, 1953; Ogata, 1964; Шестаков, 1969; Ogata, 1970; Шестаков и др., 2007). Приведем основные свойства этой функции (Eldor, Dagan, 1972; Корольков, 1976; Toride et al., 1993; Шестаков и др., 2007):

$$J(\eta, 0) = e^{-\eta}, J(\eta, \infty) = 1, \quad (1.94a)$$

$$J(0, \tau) = 1, J(\infty, \tau) = 0, \quad (1.94б)$$

$$\frac{\partial J(\eta, \tau)}{\partial \eta} = -\exp(-\eta - \tau) I_0(2\sqrt{\eta\tau}), \quad (1.94в)$$

$$\frac{\partial J(\eta, \tau)}{\partial \tau} = \exp(-\eta - \tau) \sqrt{\frac{\eta}{\tau}} I_1(2\sqrt{\eta\tau}), \quad (1.94г)$$

$$J(\eta, \tau) + J(\tau, \eta) = 1 + \exp(-\eta - \tau) I_0(2\sqrt{\eta\tau}), \quad (1.94д)$$

здесь $I_0(y)$ и $I_1(y)$ – модифицированные функции Бесселя нулевого и первого порядка.

Представленные соотношения могут оказаться полезными при поиске новых решений данного типа миграционных задач. Так, для нахождения решения для *импульсной входной функции* можно воспользоваться ранее приведенным соотношением (1.41), которое перепишем в виде

$$C_i = \frac{\alpha M_0}{Sv} \frac{d\bar{C}}{d\tau} = \frac{\alpha M_0}{Sv} \frac{dJ(\eta, \tau)}{d\tau}, \quad (1.95)$$

Определяя производную функции Гольдштейна по (1.94г), получаем новое решение

$$C_i = \frac{\alpha M_0}{Sv} \exp(-\eta - (\tau - \tau_w)) \sqrt{\frac{\eta}{\tau - \tau_w}} I_1[2\sqrt{\eta(\tau - \tau_w)}], \tau > \tau_w. \quad (1.96)$$

где $\tau = \alpha t$, $\tau_w = \alpha t_w$, $\eta = \sigma \alpha t_w = \sigma \tau_w$.

Решение для импульса (1.96) при наличии распада ($\lambda > 0$) корректируется посредством умножения (1.96) на $\exp(-\gamma\tau)$:

$$C_i = \frac{\alpha M_0}{Sv} \exp(-\eta - \gamma\tau_w - (1 + \gamma)(\tau - \tau_w)) \sqrt{\frac{\eta}{\tau - \tau_w}} I_1[2\sqrt{\eta(\tau - \tau_w)}], \tau > \tau_w. \quad (1.96a)$$

Для *ступенчатой входной функции* (1.5) при $\lambda > 0$ решение Гольдштейна (1.93) трансформируется к виду (Румынин, 2011):

$$C = C_0 \exp[-\eta(1 + \gamma/\sigma)] \left\{ 1 + \int_0^{\tau - \tau_w} e^{-z(1 + \gamma)} \sqrt{\frac{\eta}{z}} I_1(2\sqrt{\eta z}) dz \right\}, \quad (1.97)$$

где $\eta = \sigma \alpha t_w$, $\tau = \alpha t$, $\tau_w = \alpha t_w$, $\sigma = K_\Gamma / n$, $\gamma = \lambda / \alpha$, $I_1(y)$ – модифицированная функция Бесселя.

1.4.2. Общее решение

Чаще всего для исследования процесса в полной постановке, учитывающей конвективную дисперсию кинетически сорбируемого нестабильного компонента ($D_L > 0$, $\lambda > 0$), решение задачи ищется в изображениях по Лапласу, используя интегральные преобразования для концентрационных функций C и N

$$\tilde{C}(x, p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} C(x, t) dt, \quad \tilde{N}(x, p) = \int_0^{\infty} e^{-pt} N(x, t) dt. \quad (1.98)$$

При «нулевых» начальных условий система уравнений в области изображений трансформируется к виду:

$$p\tilde{C} + \lambda\tilde{C} + \lambda\tilde{N}/n + p\tilde{N}/n + u \frac{d\tilde{C}}{dx} - D_L \frac{d^2\tilde{C}}{dx^2} = 0, \quad (1.99)$$

$$p\tilde{N} = \alpha(K_\Gamma \tilde{C} - \tilde{N}) - \lambda\tilde{N}. \quad (1.100)$$

Из последнего алгебраического уравнения (1.100) получаем линейную зависимость, связывающую функции-изображения концентраций, \tilde{N} и \tilde{C} :

$$\tilde{N} = \frac{\alpha K_\Gamma}{p + \alpha + \lambda} \tilde{C}. \quad (1.101)$$

Рассматривая совместно (1.99) и (1.101), приходим к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка

$$D_L \frac{d^2\tilde{C}}{dx^2} - u \frac{d\tilde{C}}{dx} - \chi\tilde{C} = 0, \quad (1.102)$$

$$\chi = (p + \lambda) \left(1 + \frac{\sigma\alpha}{p + \alpha + \lambda} \right), \quad (1.103)$$

где $\sigma = K_d \rho_b / n$.

Для ступенчатой входной функции (1.5) решение задачи в изображениях принимает вид:

$$\tilde{C} = \frac{C_0}{p} \exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right) \exp\left(-\frac{ux}{2D_L} \sqrt{1 + \frac{4D_L}{u^2} \chi}\right), \quad (1.104)$$

Процедуре обращения полного решения в изображениях (1.99) в область оригинала посвящен ряд исследований (De Smedt, Wierenga, 1979; Toride et al., 1993; De Smedt, 2006; см. также разд. 2.3 и 2.5). В частности, в работе (Toride et al., 1993) предлагается следующее решение в замкнутой форме, отвечающее ступенчатой входной

концентрационной функции (1.5 – постоянная концентрация C_0 во входном сечении потока):

$$\begin{aligned} \frac{C}{C_0} &= G(\eta, \tau) \exp\left(-\frac{\sigma\tau}{1+\gamma}\right) + \\ &+ \int_0^\tau G(\eta, \rho) \exp(-a-b) \left\{ \frac{\sigma}{1+\gamma} I_0(2\sqrt{ab}) + \left(\frac{\sigma\rho}{\tau-\rho}\right)^{1/2} I_1(2\sqrt{ab}) \right\} d\rho, \end{aligned} \quad (1.105)$$

$$G(\eta, \nu) = \frac{1}{2} \exp\left[\frac{Pe(1-\mu)}{2}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{\eta-\mu\nu}{\sqrt{4\eta\nu/Pe}}\right] + \frac{1}{2} \exp\left[\frac{Pe(1+\mu)}{2}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{\eta+\mu\nu}{\sqrt{4\eta\nu/Pe}}\right],$$

$$a = \frac{\sigma\rho}{1+\gamma}, \quad b = (1+\gamma)(\tau-\rho), \quad \mu = \sqrt{1 + \frac{4\gamma\eta}{Pe} \left(1 + \frac{\sigma}{1+\gamma}\right)}, \quad \eta = \alpha x / u, \quad \tau = \alpha t, \quad Pe = \frac{ux}{D_L}, \quad \gamma = \lambda / \alpha,$$

$$\sigma = K_d \rho_b / n.$$

В случае распада вещества на границе (1.8) решение в изображениях по Лапласу имеет вид

$$\tilde{C} = \frac{C_0}{p+\lambda} \exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right) \exp\left(-\frac{ux}{2D_L} \sqrt{1 + \frac{4D_L}{u^2} \chi}\right). \quad (1.106)$$

Оригинал функции концентрации может быть получен обращением (1.106) или из решения (1.105) согласно правилу (1.63):

$$\begin{aligned} \frac{C}{C_0} &= G(\eta, \tau) \exp[-(\sigma+\gamma)\tau] \\ &+ \int_0^\tau G(\eta, \rho) \exp(-a-b-\gamma\tau) \left\{ \sigma I_0(2\sqrt{ab}) + \left(\frac{\sigma\rho}{\tau-\rho}\right)^{1/2} I_1(2\sqrt{ab}) \right\} d\rho, \end{aligned} \quad (1.107)$$

$$\text{где } G(\eta, \nu) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc}\left[\frac{\eta-\nu}{\sqrt{4\eta\nu/Pe}}\right] + \frac{1}{2} \exp(Pe) \operatorname{erfc}\left[\frac{\eta+\nu}{\sqrt{4\eta\nu/Pe}}\right],$$

$$a = \sigma\rho, \quad b = \tau - \rho, \quad \eta = \alpha x / u, \quad \tau = \alpha t, \quad Pe = \frac{ux}{D_L}, \quad \gamma = \lambda / \alpha, \quad \sigma = K_d \rho_b / n. \quad \text{При } x = 0 \quad G = 1.$$

Для импульсной входной концентрационной функции решение (1.102) принимает вид:

$$\tilde{C}_i = \frac{M_0}{Sv} \exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right) \exp\left(-\frac{ux}{2D_L} \sqrt{1 + \frac{4D_L}{u^2} \chi}\right). \quad (1.108)$$

Обращение (1.108) в область оригинала приводит к решению (Toride et al., 1993)

$$C_i = \frac{M_0 \alpha}{Sv} f(\eta, \tau), \quad (1.109)$$

$$f(\eta, \tau) = \int_0^{\tau} \left(\frac{\sigma \rho}{(\tau - \rho)} \right)^{1/2} \Gamma_1(\eta, \rho) H_1(\tau, \rho) d\rho, \quad (1.1110)$$

$$\Gamma_1(\eta, \rho) = \exp(-\gamma\rho) \sqrt{\frac{\eta Pe}{4\pi\rho^3}} \exp\left[-\frac{Pe(\eta - \rho)^2}{4\eta\rho}\right],$$

$$H_1(\tau, \rho) = \exp[-\sigma\rho - (1 + \gamma)(\tau - \rho)] I_1[2\sqrt{\sigma\rho(\tau - \rho)}].$$

Литература

- Bear J. Dynamics of fluids in porous media. Dover Publ., INC. N. Y., 1972. 764 p.
- Bosma W.J.P., van der Zee S.E.A.T.M. Analytical approximation for nonlinear adsorbing solute transport and first-order degradation // *Transport in Porous Media*. 1993. Vol. 11. P. 33–43.
- Brenner H. The diffusion model of longitudinal mixing in beds of finite length // *Chem. Eng. Sci.* 1962. Vol. 17. P. 229–243.
- De Smedt F. Analytical solution for transport of decaying solutes in rivers with transient // *Journ. of Hydrol.* 2006. Vol. 330. P. 672–680.
- De Smedt F., Wierenga P.J. A generalized solution for solute flow in soils with mobile and immobile water // *Water Res. Res.* 1979. Vol. 15, N 5. P. 1137–1141.
- Eldor M., Dagan G. Solutions of hydrodynamic dispersion in porous media // *Water Res. Res.* 1972. Vol. 8. No. 5. P. 1316–1331.
- Furnas C.C. Evaluation of the modified Bessel function of the first kind and zeroth order // *The American Mathematical Monthly*. 1930. Vol. 37, N 6. P. 282–287. Ogata A. Mathematics of dispersion with linear adsorption isotherm // *U.S. Geol. Surv., Prof. Pap.* 1964. N 411-H. P. 1–9.
- Gershon N.D., Nir A. Effects of boundary conditions of model on tracer distribution in flow through porous medium // *Water Res. Res.* 1969. Vol. 5. N 4. P. 830–839.
- Goldstein S. On the mathematics of exchange processes in fixed columns. I. Mathematical solutions and asymptotic expansions. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A // Mathematical and Physical Sciences*. 1953. Vol. 219. N 1137. P. 151–171.
- Govindaraju R., Das B. *Moment Analysis for Subsurface Hydrologic Application*. Water Science and Technology Library. 2007. Vol. 61. P. 29–56.
- Lapidus L., Amundson N.R. Mathematics of adsorption in beds. VI. The effects of longitudinal diffusion in ion exchange and chromatographic columns // *Journ. Phys. Chem.* 1952. Vol. 56, N 8. P. 984–995.

Leij F.J., Torido N. Discrete time- and length-average solutions of the advection-dispersion equation // *Water Res. Res.* 1995. Vol. 31. N 7. P. 1713–1724.

Leij F.J., Torido N. Discrete time- and length-average solutions of the advection-dispersion equation // *Water Res. Res.* 1995. Vol. 31. N 7. P. 1713–1724.

Lenda A., Zuber A. Tracer dispersion in groundwater experiments // *Proceedings of a Symposium on the Use of Isotopes in Hydrology*. International Atomic Energy Agency. Vienna, 1970. P. 619–641.

Lindstrom F.T., Boersma L. Analytical solution for convective-dispersion transport in confined aquifers with different initial and boundary conditions // *Water Res. Res.* 1989. Vol. 25. N 2. P. 241–256.

Ogata A. Theory of dispersion in a granular medium. Fluid movement in Earth materials. US GS Professional Paper, N 411-I. Washington, 1970. 34 p.

Ogata A., Banks R.B. A solution of the differential equation of longitudinal dispersion in porous media. U.S. Geol. Survey Prof. Paper 411-A. 1961. 7 p.

Perez Guerrero J.S., Pontedeiro E.M., van Genuchten M.Th., Skaggs T.H. (2013). Analytical solutions of the one-dimensional advection–dispersion solute transport equation subject to time-dependent boundary conditions. *Chemical Engineering Journal*. V. 221 p. 487–491.

Stehfest H. Algorithm 368: Numerical inversion of Laplace transforms // *Communications of the ACM*. 1970. Vol. 13. P. 47–49, 624. Talbot A. The accurate inversion of Laplace transforms // *Journ. Inst. Math. Appl.* 1979. Vol. 23. P. 97–120.

Torido N., Leij F.J., van Genuchten M.Th. A comprehensive set of analytical solutions for nonequilibrium solute transport with first-order decay and zero-order production // *Water Res. Res.* 1993, Vol. 29, N 7. P. 2167-2182.

Tsang, Y. W., and C. F. Tsang (1989). Flow channeling in a single fracture as a two-dimensional strongly heterogeneous permeable medium, *Water Resour. Res.*, 25(9), 2076–2080.

Van Genuchten M. Th., Alves W.J. Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation // U.S. Department of Agriculture. Technical Bulletin. 1982, N. 1661, 151 p.

Van Genuchten M.Th. Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first order decay // *Journ. of Contam. Hydrol.* 1981. Vol. 49. P. 213–233.

Zuber A. Theoretical possibilities of the two-well pulse method. *Isotope Techniques in Groundwater Hydrology* // International Atomic Energy Agency. Vienna, 1974. P. 277–294.

- Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979. 830 с.
- Баренблатт Г.И., Ентов В.М., Рыжик В.М. Теория нестационарной фильтрации жидкости и газа. М.: Недра, 1972. 288 с.
- Бейтмен Г., Эрдейи А. Таблицы интегральных преобразований. Т. 1: Преобразования Фурье, Лапласа, Меллина. Перев. с англ. М.: Наука, 1969. 343 с.
- Деч Г. Руководство к практическому применению преобразования Лапласа. С приложением таблиц, составленных Р.Гершелем. Перев. с нем. М.: Наука, 1965. 288 с.
- Диткин В.А., Прудников А.П. Интегральные преобразования и операционное исчисление. М.: Физматгиз, 1961. 524 с.
- Диткин В.А., Прудников А.П. Операционное исчисление. М.: Высшая школа, 1975. 407 с.
- Корольков Б.П. Специальные функции для исследований динамики нестационарного теплообмена. М.: Наука, 1976. 166 с.
- Румынин В.Г. Геомиграционные модели в гидрогеологии. Санкт-Петербург, Наука, 2011, 1158 с.
- Шестаков В. М. О кинетике сорбции на грунтах // Гидрогеологические вопросы подземного захоронения промстоков. Тр. ВСЕГИНГЕО. 1969. вып.14. С. 23–34.
- Шестаков В.М. Гидрогеодинамика. М.: Изд-во МГУ, 1995. 368 с. Мироненко В.А. Динамика подземных вод. М.: МГГУ, 1996. 519 с.
- Шестаков В.М., Невечеря И.К., Авилина И.В. Моделирование контаминации патогенных микроорганизмов в подземных водах. М., 2007. 95 с.

**Основные аналитические решения задач миграции вещества в подземных водах
(продолжение)**

проф. Румынин В.Г.

2. Водоносные горизонты в трещиновато-пористых породах

Предполагается, что пласт представлен трещиновато-пористыми породами, в которых конвекция вещества в трещинах сопровождается гидродинамической дисперсией фронта вытеснения и осложнена его диффузионным обменом с пористыми блоками. Вещество сорбируется на поверхности трещин и в пористых блоках (матрице). Как в трещинах, так и в блоках происходит распад вещества (кинетическая реакция первого порядка), который характеризуется одинаковым коэффициентом распада.

2.1. Математическая формализация миграционного процесса

В достаточно общем виде одномерная миграция нестабильного (распадающегося) компонента в трещиновато-пористой среде описывается следующим уравнением конвективной дисперсии

$$n \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda n C + W_s + W_d + v \frac{\partial C}{\partial x} - D_{eL} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0, \quad (2.1)$$

в котором функции источников W_s и W_d ассоциируются, соответственно, с сорбцией на поверхности трещин и диффузионными обменными процессами на контакте с пористой матрицей (пористыми блоками); здесь C – объемная концентрация вещества в растворе, заполняющем трещинное пространство, n – трещиноватость, λ – константа распада, v – скорость фильтрации Дарси, D_{eL} – коэффициент эффективной продольной гидродисперсии (1.2)

Функция источника W_s , отвечающая за сорбцию на поверхности трещин, определяется выражением (1.15), где $N = S_b S_f = S_b K_a C$ – масса вещества, адсорбированного трещинами, в единице объема породы. Тогда уравнение (2.1) преобразуется к виду

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \lambda R C + \frac{W_d}{n} + u \frac{\partial C}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = 0, \quad (2.2)$$

здесь $u = v/n$ – действительная скорость фильтрации в трещинах, $D_L = D_{eL}/n$, R – фактор сорбционной задержки в трещинах,

$$R = 1 + \frac{S_b K_a}{n}, \quad (2.3)$$

K_a – коэффициент сорбционного распределения для поверхности трещин [м], S_b – удельная поверхность блоков [м⁻¹].

Функция-источник W_d , определяющая массовый поток из трещин в блоки, имеет два основных асимптотических представления, отвечающие расчетным моделям (схемам) (Мироненко, Румынин, 1998; Румынин, 2011):

- неограниченной емкости (для малых моментов времени);
- сосредоточенной емкости (для продолжительных периодов времени).

В первом случае пористые блоки рассматриваются как неограниченная среда, и массообмен между трещинами и блоками описывается градиентным законом Фика:

$$W_d = -S_b D_{em} \left\langle \frac{\partial C_m}{\partial z} \right\rangle_{z \in S} \equiv -S_b D_{em} \left. \frac{\partial C_m}{\partial z} \right|_{z=0}, \quad (2.3)$$

где z – внутренняя нормаль к поверхности блока ($z = 0$ – поверхность блока), $C_m = C_m(z, t)$ – текущая концентрация в блоке, D_{em} – коэффициент эффективной диффузии блоков, n_m – пористость блоков (матрицы).

Пористые блоки могут быть представлены двумя идеализированными геометрическими формами – шарами и пластинами (рис. 2.1).

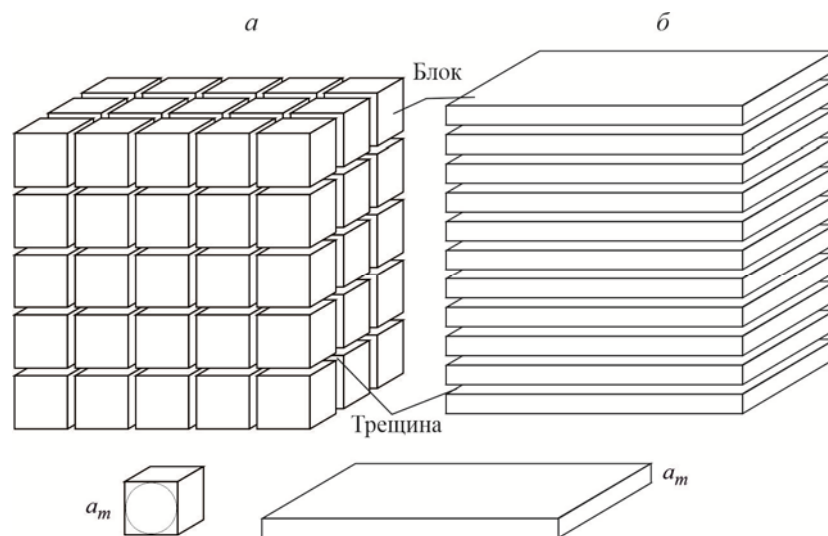


Рис. 2.1. Концептуальная модель представления трещинно-блочной среды.

Диффузия вещества внутри блоков осуществляется по траекториям, близким к плоскопараллельным, и описывается одномерным уравнением, которое для сорбируемого и распадающегося компонента имеет вид:

$$R_m n_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \lambda R_m n_m C_m = D_{em} \frac{\partial^2 C_m}{\partial z^2}, \quad (2.4)$$

где R_m – фактор сорбционной задержки в пористых блоках (матрице),

$$R_m = 1 + \frac{\rho_b K_d}{n_m}, \quad (2.4a)$$

K_d – коэффициент сорбционного распределения вещества в порах блоков [$\text{см}^3/\text{г}$].

Предпосылка неограниченной емкости,

$$C_m(z \rightarrow \infty, t) = 0, \quad (2.5)$$

с точки зрения математической формализации процесса, предполагает, что средний размер пористого блока, a_m , достаточно большой в сравнении с размером зоны диффузионного переноса в блоке, $a_m^2 \gg D_{em} t / n_m R_m$ (Мироненко, Румынин, 1998). Отсюда – область применения расчетной модели неограниченной емкости

$$D_{em} t / a_m^2 n_m R_m \leq 0.3 - 0.5, \quad (2.6)$$

Для расчетной схемы сосредоточенной емкости массовый поток определяется изменением средней концентрации в блоке, $C_m = C_m(t)$,

$$W_d = n_m R_m \frac{\partial C_m}{\partial t} + \lambda n_m R_m C_m, \quad (2.7)$$

а скорость обмена определяется уравнением кинетики первого порядка, которое с учетом сорбции и распада принимает вид

$$\frac{\partial C_m}{\partial t} = \alpha_m (C - C_m) - \lambda C_m, \quad (2.8)$$

$$\alpha_m = \frac{\omega D_{em}}{a_m^2 n_m R_m} \quad (2.8a)$$

– комплексный коэффициент массообмена; a_m – размер блока (для блоков в форме пластин – толщина пластины, для блоков в форме шара – радиус), ω – «фактор формы»: $\omega = 3$ – пластина, $\omega = 15$ – шар. Ориентировочный критерий применимости расчетной схемы сосредоточенной емкости

$$\alpha_m t > 0.5 - 0.7. \quad (2.9)$$

2.2. Преобразования концентрационных функций в область изображений по Лапласу

Решение задачи может быть получено в изображениях по Лапласу относительно времени t

$$\tilde{C}(x, p) = \int_0^{\infty} e^{-p\tau} C(x, \tau) d\tau, \quad \tilde{C}_m(x, p) = \int_0^{\infty} e^{-p\tau} C_m(x, \tau) d\tau, \quad \tilde{C}_m(p) = \int_0^{\infty} e^{-p\tau} C_m(\tau) d\tau, \quad (2.10)$$

где p – комплексный параметр преобразования по времени t .

Уравнение конвективной дисперсии в частных производных (2.2) в изображениях принимает вид обыкновенного дифференциального уравнения второго порядка

$$\frac{D_L}{R} \frac{d^2 \tilde{C}}{dx^2} - \frac{u}{R} \frac{d\tilde{C}}{dx} - \frac{\tilde{W}_d}{nR} - (p + \lambda) \tilde{C} = 0, \quad (2.11)$$

Уравнение молекулярной диффузии в блоках (2.4) преобразуется следующим образом

$$\frac{D_{em}}{R_m n_m} \frac{d^2 \tilde{C}_m}{dz^2} - (p + \lambda) \tilde{C}_m = 0. \quad (2.12)$$

Решение уравнения (2.12) при условии на бесконечности (2.5) позволяет определить производную для изображения \tilde{W}_d в уравнении функции-источника (2.31)

$$\left. \frac{\partial \tilde{C}_m}{\partial z} \right|_{z=0} = -(p + \lambda)^{1/2} \tilde{C}, \quad (2.13)$$

откуда (см. 2.3) для расчетной схемы неограниченной емкости получаем:

$$\tilde{W}_d = R_m n_m \sqrt{\lambda_m (p + \lambda)} \tilde{C}, \quad (2.14)$$

$$\lambda_m = \frac{S_b^2 D_{em}}{n_m R_m} \quad (2.14a)$$

– комплексный коэффициент массообмена (при рассмотрении процесса в рамках данной физической предпосылки емкости); $S_b = 3/a_m$ – шар, $S_b = 2/a_m$ – пластина; a_m – размер блока (для блоков в форме пластин – толщина пластины, для блоков в форме шара – радиус).

Сравнивая (2.8a) и (2.14a), можно показать, что, например, для блоков изометрической формы (представляемых в форме шаров) комплексные массообменные параметры α_m и λ_m связаны приближенным соотношением

$$\alpha_m \approx 2\lambda_m. \quad (2.14б)$$

С практической точки зрения это означает, что найденный в ходе кратковременных трассерных экспериментов коэффициент λ_m (расчетная схема неограниченной емкости)

можно использовать для долговременных прогнозов в рамках модели сосредоточенной емкости, где параметром, контролирующим массообмен является коэффициент α_m , удвоив полученное значение λ_m .

Для расчетной схемы сосредоточенной емкости из (2.7) и (2.8) получаем

$$\tilde{W}_d = R_m n_m (p + \lambda) \tilde{C}_m, \quad (2.15)$$

$$p \tilde{C}_m = \alpha_m (\tilde{C} - \tilde{C}_m) - \lambda \tilde{C}_m. \quad (2.16)$$

Отсюда находим изображение функции источника:

$$\tilde{W}_d = \frac{R_m n_m \alpha_m (p + \lambda)}{p + \lambda + \alpha_m} \tilde{C}. \quad (2.17)$$

Как видно, для двух асимптотик выражения для функции W_d подобны: W_d линейно зависит от концентрации в трещинах, \tilde{C} . Поэтому решение сводится к обыкновенному дифференциальному уравнению второго порядка:

$$\frac{D_L}{R} \frac{d^2 \tilde{C}}{dx^2} - \frac{u}{R} \frac{d \tilde{C}}{dx} - \beta \tilde{C} = 0, \quad (2.18)$$

где структура коэффициента β вытекает из уравнений (2.21) и выражений для функции источника также в изображениях (2.14) и (2.17):

– для расчетной схемы неограниченной емкости

$$\beta = p + \lambda + \sigma \sqrt{\lambda_m (p + \lambda)}, \quad (2.19)$$

– для расчетной схемы сосредоточенной емкости

$$\beta = p + \lambda + \frac{\sigma \alpha_m (p + \lambda)}{p + \lambda + \alpha_m}, \quad (2.20)$$

где комплексный параметр

$$\sigma = \frac{n_m R_m}{n R} \quad (2.20a)$$

представляет соотношение сорбционных емкостей блоков и трещин.

Общее решение уравнения (2.18) представим для произвольного входного сигнала $C(0, t) = C_0(t)$ (1.4) представим в виде

$$\tilde{C} = \tilde{C}_0(p) \exp\left(\frac{ux}{2D_L}\right) \exp\left(-\frac{ux}{2D_L} \sqrt{1 + \frac{4RD_L}{u^2} \beta}\right), \quad (2.21)$$

или

$$\tilde{C} = \tilde{C}_0(p) \exp\left(\frac{Pe}{2}\right) \exp\left(-\frac{Pe}{2} \sqrt{1 + \frac{4Rt_w}{Pe} \beta}\right), \quad (2.22)$$

где $t_w = x/u$, $Pe = ux/D_L$ (переменная, которая может ассоциироваться с числом Пекле).

В случае пренебрежения дисперсией ($D_L = 0$, что эквивалентно $Pe \rightarrow \infty$):

$$\tilde{C}(t_w) \Big|_{Pe \rightarrow \infty} = \tilde{C}_0(p) \exp(-Rt_w \beta). \quad (2.23)$$

Большинство из рассматриваемых ниже решений основываются на обратных преобразованиях решений в изображениях по Лапласу (2.22) и (2.23). При этом многие из этих преобразований заимствованы из решений, не относящихся напрямую к транспорту растворенного вещества в трещиновато-пористых средах. Здесь использована аналогия и/или формальное подобие с моделями, разработанными в смежных областях физико-химической гидродинамики для неравновесной сорбции, или моделями, предназначенными для описания потоков вещества в пористых средах с застойными зонами и различными типами сорбционных площадок.

2.3. Обобщенное решение в форме интеграла-свертки

Процедура обращения операционного решения (2.22) в область оригинала может быть упрощена, если воспользоваться математическим тождеством (Tang et al., 1981):

$$\exp(-2\chi) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \exp\left(-\xi^2 - \frac{\chi^2}{\xi^2}\right) d\xi. \quad (2.24)$$

В результате имеем

$$\tilde{C} = \exp\left(\frac{Pe}{2}\right) \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \tilde{C}_0(p) \exp\left(-\xi^2 - \frac{Pe^2}{16\xi^2}\right) \exp\left[-\frac{Pe^2}{16\xi^2} Rt_w \beta\right] d\xi, \quad (2.25)$$

где ξ – переменная интегрирования, не имеющая, строго говоря, определенного физического смысла.

Подстановка в (2.25) новой переменной (Liu et al., 2018)

$$\tau = \frac{Pe}{4\xi^2} t_w \quad (2.25a)$$

позволяет преобразовать уравнение (2.25), приведя его к «смешанному» интегральному виду (Liu et al., 2018)

$$\tilde{C} = \int_0^{\infty} f(\theta) \tilde{C}_0(p) \exp[-R\beta\theta] d\theta, \quad (2.26)$$

где

$$f(\tau) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{t} \sqrt{\frac{Pet_w}{t}} \exp\left(\frac{Pe}{2} - \frac{Pe}{4} \frac{t_w}{t} - \frac{Pe}{4} \frac{t}{t_w}\right) \quad (2.28)$$

– функция, которая не зависит от комплексной переменной p , константы распада λ , и обменного комплекса (λ_m или α_m), т.е. $f(\tau)$ – функция отклика системы на импульсный входной концентрационный сигнал, когда игнорируются все транспортные процессы, за исключением конвекции и гидродинамической дисперсии в трещинах.

Нетрудно заметить, что второе произведение в подынтегральном выражении (2.26) отвечает асимптотике решения задачи в изображениях по Лапласу (2.23). Для многих практически значимых ситуаций для оператора (2.23) существует оригинал, который можно представить в форме

$$C(t_w)|_{pe \rightarrow \infty} = L^{-1}[\tilde{C}(t_w)] = g(t - Rt_w, Rt_w)H(t - Rt_w), \quad (2.29)$$

где функция оригинала g (ML^{-3}) подразумевает зависимость, как от временной сдвигки ($t - Rt_w$), так и от собственно величины Rt_w ; $L^{-1}[\tilde{C}(t_w)]$ – символ обратного преобразования Лапласа; $H(t)$ – ступенчатая функция Хэвисайда. Тогда правила операционных вычислений позволяют записать (2.26) в форме (Liu et al., 2018)

$$C = \int_0^{\infty} f(\theta)C(t, \theta)|_{pe \rightarrow \infty} d\theta, \quad (2.30)$$

что эквивалентно

$$C = \int_0^{t/R} f(\theta)g(t - R\theta, R\theta)d\theta. \quad (2.31)$$

В задачах линейного массообмена, в которых массовые потоки пропорциональны градиенту концентрации или разности концентрации между трещинами и поровыми растворами, время t (и переменная интегрирования θ) в (2.31) могут быть нормированы относительно одного из коэффициентов массообмена, в зависимости от рассматриваемого режима массообмена в пласте: $\tau = \omega t$, $y = \omega R\theta$ ($\omega = \lambda_m$ – расчетная схема неограниченной емкости, $\omega = \alpha_m$ – расчетная схема сосредоточенной емкости), что позволяет переписать (2.31) в форме

$$C = \int_0^{\tau} f(y)g(\tau - y, y)dy, \quad (2.32)$$

которая может ассоциироваться с «интегралом-свертки»; в такой записи собственно функция g сохраняет размерность концентрации (ML^{-3}).

Аналитические решения $C(\tau, y)|_{pe \rightarrow \infty}$, отвечающие двум базовым моделям (неограниченной и сосредоточенной емкости) и входным концентрационным сигналам (ступенчатому, импульсному и пакетному), хорошо известны. Как будет видно из

дальнейшего анализа, функция $g(\tau - y, y)$ имеет различные представления и могут быть определены из обращения решения (2.23):

– для ступенчатого сигнала:

$$\tilde{C} = \frac{C_0}{p} \exp(-Rt_w \beta), \quad (2.33)$$

– для импульсного сигнала:

$$\tilde{C}_i = \frac{M_0}{Sv} \exp(-Rt_w \beta). \quad (2.34)$$

2.4. Расчетная схема неограниченной емкости

2.4.1. Операционное решение и его обращение в область оригинала

В специальной литературе решение (2.25) для *ступенчатой входной функции*, переписанное в виде

$$\tilde{C} = \exp\left(\frac{Pe}{2}\right) \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} \frac{C_0}{p} \exp\left(-\xi^2 - \frac{Pe^2}{16\xi^2}\right) \exp\left[-\frac{Pe^2}{16\xi^2} Rt_w (p + \lambda + \sigma\sqrt{\lambda_m(p + \lambda)})\right] d\xi, \quad (2.35)$$

получило название *уравнения Танга* (Tang et al., 1981) в области изображений по Лапласу.

Переход в область оригинала \tilde{C} (2.35) можно представить в виде (Tang et al., 1981):

$$\begin{aligned} & \exp\left[-\xi^2 - \frac{Pe^2}{16\xi^2}\right] \exp(-\gamma\omega) \times \\ & \frac{C}{C_0} = \frac{\exp(Pe/2)}{\sqrt{\pi}} \int_l^{\infty} \left\{ \exp[-\sigma\omega\sqrt{\gamma}] \operatorname{erfc}\left[\frac{\sigma\omega}{2(\tau-\omega)^{1/2}} - \sqrt{\gamma}(\tau-\omega)^{1/2}\right] + \right. \\ & \left. + \exp[\sigma\omega\sqrt{\gamma}] \operatorname{erfc}\left[\frac{\sigma\omega}{2(\tau-\omega)^{1/2}} + \sqrt{\gamma}(\tau-\omega)^{1/2}\right] \right\} d\xi, \quad (2.36) \end{aligned}$$

где $\eta = \lambda_m Rx / u$, $\tau = \lambda_m t$, $Pe = ux / D_L$, $\gamma = \lambda / \lambda_m$, $\sigma = R_m n_m / Rn$, $\omega = \eta Pe / 4\xi^2$, $l = (\eta Pe / 4\xi^2)^{1/2}$.

При поршневом характере движения сорбируемого нестабильного компонента в пласте ($D_L = 0$, $\lambda > 0$) решение (2.36) преобразуется к виду:

$$\frac{C(\eta, \tau)}{C_0} = \frac{1}{2} e^{-\gamma\eta} \left[e^{-\sigma\eta\sqrt{\gamma}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\sigma\eta}{2\sqrt{\tau-\eta}} - \sqrt{\gamma}(\tau-\eta)\right) + e^{\sigma\eta\sqrt{\gamma}} \operatorname{erfc}\left(\frac{\sigma\eta}{2\sqrt{\tau-\eta}} + \sqrt{\gamma}(\tau-\eta)\right) \right], \quad (2.37)$$

где $\eta = \lambda_m t_0$, $\tau = \lambda_m t$, $t_0 = Rx / u$; решение предполагает $\tau \geq \eta$. К решению (2.37) непосредственно приводит обращение формулы (2.33) в область оригинала.

При $t \rightarrow \infty$ формула (72.37) дает стационарное распределение концентрации

$$\bar{C} = \exp\left[-t_0(\lambda + \sigma\sqrt{\lambda\lambda_m})\right]. \quad (2.38)$$

Таким образом, как и в гомогенных породах, процесс распада приводит к формированию квазистационарных ореолов загрязнения. Однако благодаря обмену веществом между трещинами и блоками степень локализации ореолов выше: длина переходной зоны Δx_λ сокращается по сравнению с гомогенным пластом в $1+\gamma$ раз (Мироненко, Румынин, 1998).

Для условий поршневого движения стабильного компонента решение задачи получается непосредственно из формулы (2.37), преобразовав ее при $\lambda = 0$ и $D_L = 0$.

$$\bar{C}(\eta, \tau) = \operatorname{erfc}\left(\frac{\sigma\eta}{2\sqrt{\tau-\eta}}\right), \quad \tau \geq \eta, \quad (2.39)$$

в русскоязычной литературе нередко называемой решением Ловерье (Мироненко, Румынин, 1986); здесь $\tau = \lambda_m t$, $\eta = \lambda_m t_0$, $t_0 = Rx/u$, $\sigma = R_m n_m / Rn$.

Наконец, для импульсного входного сигнала при пренебрежимо малой дисперсии ($D_L = 0$) к искомому решению приводит обращение формулы (2.34):

$$C_i(\eta, \tau) = \frac{M_0 \lambda_m}{Sv} \frac{\sigma\eta}{2\sqrt{\pi(\tau-\eta)^3}} \exp\left[-\frac{(\sigma\eta)^2}{4(\tau-\eta)} - \gamma\tau\right]. \quad (2.40)$$

2.4.2. Решение задачи в форме интеграла-свертки ($D_L > 0$ и $\lambda > 0$)

Как показано в разд. 2.3, решение задачи в интегральной форме (2.32) предполагает нахождения аналитического выражения для функции g , отвечающей специальным образом записанному решению задачи поршневого вытеснения ($Pe \rightarrow \infty$).

Приведенное ранее решение для *ступенчатого входного сигнала* (2.37) ($Pe \rightarrow \infty$) представим в виде:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \exp(-\lambda R t_w) \left\{ \begin{array}{l} \exp(-\sigma R t_w \sqrt{\lambda_m} \sqrt{\lambda}) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sigma R t_w \sqrt{\lambda_m}}{2\sqrt{t-Rt_w}} - \sqrt{\lambda(t-Rt_w)}\right) H(t-Rt_w) + \\ + \exp(\sigma R t_w \sqrt{\lambda_m} \sqrt{\lambda}) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sigma R t_w \sqrt{\lambda_m}}{2\sqrt{t-Rt_w}} + \sqrt{\lambda(t-Rt_w)}\right) H(t-Rt_w). \end{array} \right\}. \quad (2.41)$$

Откуда:

$$g(\tau - y, y) = \frac{C_0}{2} \exp(-\gamma y) \left\{ \begin{aligned} &\exp(-\sigma\sqrt{\gamma}y) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sigma y}{2\sqrt{\tau - y}} - \sqrt{\gamma(\tau - y)}\right) + \\ &+ \exp(\sigma\sqrt{\gamma}y) \operatorname{erfc}\left(\frac{\sigma y}{2\sqrt{\tau - y}} + \sqrt{\gamma(\tau - y)}\right), \end{aligned} \right\} \quad (2.42)$$

где $\eta = \lambda_m R x / u$, $\tau = \lambda_m t$, $Pe = ux / D_L$, $\gamma = \lambda / \lambda_m$, $\sigma = R_m n_m / R n$.

Таким образом, получаем искомое решение (2.32), в котором $f(y)$ может быть представлена в форме

$$f(y) = \sqrt{\frac{\eta Pe}{4\pi y^3}} \exp\left(\frac{Pe}{2} - \frac{Pe\eta}{4y} - \frac{Pe y}{4\eta}\right). \quad (2.43)$$

а $g(\tau - y, y)$ – по (2.43).

Решения Танга (2.36) и решение, полученное в форме интеграла-свертки (2.32), дают практически идентичные результаты, однако вычисление интегралов в последнем случае не встречает принципиальных сложностей, в то время как использование первого решения может потребовать определенных вычислительных усилий.

Для импульсного входного сигнала ($Pe \rightarrow \infty$) обращение формулы (2.34) дает решение

$$C_i = m_0 \frac{\sigma\sqrt{\lambda_m} R t_w}{2\sqrt{\pi}(t - R t_w)^3} \exp\left[-\frac{(\sigma\sqrt{\lambda_m} R t_w)^2}{4(t - R t_w)} - \lambda t\right] H(t - R t_w), \quad (2.44)$$

где $m_0 = M_0 / S v$ – масса вещества, поступающая в сечение потока S , характеризующегося скоростью Дарси ($S v$ – объемный расход жидкости). Для безразмерного времени:

$$C_i = \lambda_m m_0 \frac{\sigma R \tau_w}{2\sqrt{\pi}(\tau - R \tau_w)^3} \exp\left[-\frac{(\sigma R \tau_w)^2}{4(\tau - R \tau_w)} - \gamma \tau\right], \quad \tau_w = \lambda_m t_w, \quad \tau = \lambda_m t. \quad (2.44a)$$

Решению (2.40a) соответствует следующая функция g в интегральном решении (2.32)

$$g(\tau - y, y) = \frac{M_0 \lambda_m}{S v} \frac{\sigma y}{2\sqrt{\pi}(\tau - y)^3} \exp\left[-\frac{(\sigma y)^2}{4(\tau - y)} - \gamma \tau\right]. \quad (2.45)$$

Функция безразмерного времени $f(y)$ в решении (2.32) может быть представлена в форме (2.43). Тогда решение (2.32) принимает вид

$$C_i(\eta, \tau) = \frac{\lambda_m M_0}{S v} \int_0^\tau \sqrt{\frac{\eta Pe}{4\pi y^3}} \exp\left(\frac{Pe}{2} - \frac{Pe\eta}{4y} - \frac{Pe y}{4\eta}\right) \frac{\sigma y}{2\sqrt{\pi}(\tau - y)^3} \exp\left[-\frac{(\sigma y)^2}{4(\tau - y)} - \gamma \tau\right] dy, \quad (2.46)$$

$\eta = \lambda_m R x / u$, $\tau = \lambda_m t$, $Pe = ux / D_L$, $\gamma = \lambda / \lambda_m$, $\sigma = R_m n_m / R n$.

2.5. Расчетная схема сосредоточенной емкости

2.5.1. Операционное решение и его обращение в область оригинала

Переход в область оригинала \tilde{C} (2.22) для расчетной схемы сосредоточенной емкости (2.20) в общем случае $D_L > 0$ дает решение (Toride et al., 1993), подобное решению для описания кинетической линейной сорбции (разд. 1.4, ф. 1.105) (*ступенчатый входной сигнал*):

$$\begin{aligned} \frac{C(\eta, \tau)}{C_0} = & G(\eta, \tau) \exp\left(-\frac{\sigma\tau}{1+\gamma}\right) + \\ & + \int_0^\tau G(\eta, \rho) \exp(-a-b) \left\{ \frac{\sigma}{1+\gamma} I_0(2\sqrt{ab}) + \left(\frac{\sigma\rho}{\tau-\rho}\right)^{1/2} I_1(2\sqrt{ab}) \right\} d\rho, \end{aligned} \quad (2.47)$$

$$G(\eta, \nu) = \frac{1}{2} \exp\left[\frac{Pe(1-\mu)}{2}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{\eta-\mu\nu}{\sqrt{4\eta\nu/Pe}}\right] + \frac{1}{2} \exp\left[\frac{Pe(1+\mu)}{2}\right] \operatorname{erfc}\left[\frac{\eta+\mu\nu}{\sqrt{4\eta\nu/Pe}}\right],$$

$$\text{где } a = \frac{\sigma\rho}{1+\gamma}, \quad b = (1+\gamma)(\tau-\rho), \quad \mu = \sqrt{1 + \frac{4\lambda RD_L}{u^2} \left(1 + \frac{\sigma}{1+\gamma}\right)}, \quad \text{или } \mu = \sqrt{1 + \frac{4\gamma\eta}{Pe} \left(1 + \frac{\sigma}{1+\gamma}\right)},$$

где $\eta = \alpha_m Rx/u$, $\tau = \alpha_m t$, $Pe = ux/D_L$, $\gamma = \lambda/\alpha_m$, $\sigma = R_m n_m / Rn$.

Для анализа миграции в случае поршневого вытеснения ($D_L = 0$) при ступенчатом входном сигнале целесообразно воспользоваться асимптотическим решением (2.33). Обращение (2.33) при $\lambda = 0$ дает решение в виде интегральной функции Гольдштейна (1.93):

$$\bar{C}(\eta, \tau) \equiv J(\eta, \tau) = 1 - e^{-\tau} \int_0^{\sigma\eta} e^{-z} I_0(2\sqrt{z\tau}) dz, \quad (2.47a)$$

здесь $\tau = \alpha(t - t_0) \geq 0$.

Для случая $\lambda > 0$ перепишем решение (2.33) в виде (Румынин, 2011)

$$\tilde{C} = e^{-\sigma\eta} \left\{ \frac{C_0}{p} e^{-t_0(p+\lambda)} \right\} + e^{-\sigma\eta} \left\{ \frac{C_0}{p} e^{-t_0(p+\lambda)} \right\} \times \left\{ \exp\left[\frac{\alpha_m \sigma\eta}{p + \lambda + \alpha_m}\right] - 1 \right\}. \quad (2.48)$$

Для каждого множителя в фигурных скобках существует табличный оригинал. Тогда, используя дополнительно для второго слагаемого в (2.48) теорему интегральной свертки, окончательно получаем

$$\frac{C(\eta, \tau)}{C_0} = \exp[-(\sigma + \gamma)\eta] \left\{ 1 + \int_0^{\tau-\eta} \exp[-z(1+\gamma)] \sqrt{\frac{\sigma\eta}{z}} I_1(2\sqrt{\sigma\eta z}) dz \right\}, \quad (2.49)$$

где $\eta = \alpha_m t_0$, $\tau = \alpha_m t$, $t_0 = Rx/u$, $\gamma = \lambda/\alpha_m$, $I_1(y)$ – модифицированная функция Бесселя.

Для *импульсного входного сигнала* в виде дельта-функции Дирака (1.6) решение задачи ($\lambda = 0$) может быть получено дифференцирование решения Гольдштейна (2.47а) по безразмерному времени (см. разд. 1.4.1):

$$C_i(\eta, \tau) = \frac{\alpha_m M_0}{Sv} \frac{dJ(\eta, \tau)}{d\tau} = \frac{\alpha_m M_0}{Sv} \exp(-\sigma\eta - (\tau - \eta)) \sqrt{\frac{\sigma\eta}{\tau - \eta}} I_1[2\sqrt{\sigma\eta(\tau - \eta)}], \quad (2.50)$$

Домножив функцию на $\exp(-\gamma\tau)$ получаем решение для описания миграции неустойчивого компонента $\lambda > 0$:

$$C_i(\eta, \tau) = \frac{M_0 \alpha_m}{nuS} \exp(-\sigma\eta - \gamma\eta) \exp[-(1 + \gamma)(\tau - \eta)] \sqrt{\frac{\sigma\eta}{\tau - \eta}} I_1(2\sqrt{\sigma\eta(\tau - \eta)}). \quad (2.51)$$

2.5.2. Решение задачи в форме интеграла-свертки ($D_L > 0$ и $\lambda > 0$)

Представленное ранее решение задачи поршневого вытеснения ($Pe \rightarrow \infty$) для *ступенчатой входной функции* (2.49), позволяет найти выражение для подынтегрального множителя g в интегральном решении (2.32):

$$g(\tau - y, y) = C_0 \exp[-(\sigma + \gamma)y] \left\{ 1 + \int_0^y \exp[-(y - \rho)(1 + \gamma)] \sqrt{\frac{\sigma\rho}{(y - \rho)}} I_1[2\sqrt{\sigma y(y - \rho)}] d\rho \right\}. \quad (2.52)$$

Как видно, в этом случае интеграл-свертка (2.32) в своем интегральном ядре содержит интеграл с верхним пределом интегрирования, являющимся переменной интегрирования. Это создает определенные сложности в вычислительных процедурах.

Подобным образом формулу (2.51) можно использовать для нахождения функции g для построения *для импульсной входной функции* (2.32)

$$g(\tau - y, y) = \frac{M_0 \alpha_m}{Sv} \exp(-\sigma y - \gamma y) \exp[-(1 + \gamma)(\tau - y)] \sqrt{\frac{\sigma y}{\tau - y}} I_1(2\sqrt{\sigma y(\tau - y)}), \quad (2.53)$$

так что полное решение задачи ($D_L > 0, \lambda > 0$) в форме интеграла-свертки для данного входного сигнала принимает вид:

$$C_i(x, \tau) = \frac{M_0 \alpha_m}{Sv} \int_0^\tau \sqrt{\frac{\eta Pe}{4\pi y^3}} \exp\left(\frac{Pe}{2} - \frac{Pe\eta}{4y} - \frac{Pe y}{4\eta}\right) \times \exp(-\gamma y - \sigma y) \exp[-(1 + \gamma)(\tau - y)] \sqrt{\frac{\sigma y}{\tau - y}} I_1(2\sqrt{\sigma y(\tau - y)}) dy, \quad (2.54)$$

где $\eta = \alpha_m Rx/u$, $\tau = \alpha_m t$, $Pe = ux/D_L$, $\gamma = \lambda/\alpha_m$, $\sigma = R_m n_m / Rn$.

Данное решение в точности отвечает ранее полученному решению (Toride et al., 1993).

Приведем также решение для импульсного входного сигнала, формируемого в неограниченной среде ($-\infty < x < \infty$) и рассматриваемого в качестве начального условия (1.3б) (De Smedt, 2006):

$$C_i(\eta, \tau) = C_1(\eta, \tau) \exp(-\sigma\tau) + \int_0^{\tau} C_1(\eta, y) \exp[-\sigma y - (\tau - y) - \gamma(\tau - y)] \sqrt{\frac{\sigma y}{\tau - y}} I_1(2\sqrt{\sigma y(\tau - y)}) dy, \quad (2.55)$$

где $C_1(\eta, \tau) = \frac{M_0}{S} \sqrt{\frac{\eta Pe}{4\pi\tau}} \exp\left[-\frac{Pe(\eta - \tau)^2}{4\eta\tau} - \gamma\tau\right]$.

Литература

De Smedt F. Analytical solution for transport of decaying solutes in rivers with transient // Journ. of Hydrol. 2006. Vol. 330. P. 672–680.

Guerrero J.S.P., Pontedeiro E.M., van Genuchten M.Th., Skaggs T.H. (2013). Analytical solutions of the one-dimensional advection–dispersion solute transport equation subject to time-dependent boundary conditions. Chemical Engineering Journal. V. 221 p. 487–491.

Liu L., Neretnieks I, Shahkarami P., Meng S., Moreno L. (2018). Analytical solutions for temporally and spatially dependent solute dispersion of pulse type input concentration in one dimensional semi-infinite media. Hydrogeol J. v. 26, p. 297–320. DOI 10.1007/s10040-017-1627-8.

Tang D.H., Frind E.O., Sudicky E.A. (1981) Contaminant transport in fractured porous media: analytical solution for a single fracture. Water Resour Res 17(3), p. 555–564.

Toride, N., Leij, F.J., van Genuchten, M.T., 1993. A comprehensive set of analytical solutions for nonequilibrium solute transport with first-order decay and zero-order production. Water Resour. Res. V.29, No. 7, pp. 2167–2182. <https://doi.org/10.1029/93WR00496>.

Мироненко В.А., Румынин В. Г. Опытнo-миграционные работы в водоносных пластах. М.: Недра. 1986. 280 с.

Мироненко В.А., Румынин В.Г. Проблемы гидрогеоэкологии. Т. 1. Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов. М.: МГГУ, 1998а, 611 с.

Румынин В.Г. Геомиграционные модели в гидрогеологии. Санкт-Петербург, Наука, 2011, 1158 с.