

Аналитические решения уравнения одномерного массопереноса с коэффициентом дисперсии, зависящим от пространственно-временного масштаба (миграция в стохастических неоднородных средах)

проф. Румынин В.Г.

В многочисленных исследованиях установлено, что дисперсия вещества, определяемая в полевых условиях, намного больше, чем дисперсия в порах, изучаемая в лабораторном масштабе (Fetter, 1993; Gelhar; 1993; Schulze-Makuch, 2005; Zech, 2015). Полевые исследования показывают также, что расчетные коэффициенты дисперсии (определенные в рамках градиентной модели Фика), как продольной, так и поперечной, увеличиваются с ростом расстояния от источника вещества до точки наблюдения, так что детерминированные модели с постоянными коэффициентами дисперсии (дисперсивности) в ряде случаев плохо подходят для исследования миграционных процессов. Со временем, прошедшим после высвобождения вещества из источника, зависимость дисперсии от расстояния уменьшается – происходит стабилизация коэффициентов дисперсии (дисперсивности) вблизи некоторых постоянных (асимптотических) значений.

Зависимость дисперсии от пространственно-временного масштаба процесса, ассоциируемого в этом случае с понятием макродисперсии, объясняется неоднородностью пористой или трещиноватой среды – пространственной изменчивостью поля проницаемости. Время прохождения каждой частицы растворенного вещества в такой среде представляет собой сумму многих различных времен прохождения элементарных зон неоднородностей при различных скоростях; поэтому увеличение диапазона скоростей с увеличением масштаба (при условии случайной и независимой выборки пути миграции каждой частицей) приводит к более широкому распределению времени прохождения и, следовательно, к большей дисперсии. Исследования, основанные на данных мониторинга, аналитических построениях и результатах численного моделирования, свидетельствуют о том, что достижению асимптотических значений коэффициентов дисперсии (макродисперсии) может потребоваться довольно длительное время, сопоставимое со всем периодом наблюдений за миграционным процессом на конкретных участках загрязнения подземных вод.

В строгой постановке для описания миграционного процесса в неоднородных водоносных горизонтах используются стохастические модели, в которых изменчивость коэффициента фильтрации подчиняется логнормальному закону распределения и характеризуется некоторым корреляционным масштабом, определяющим тренды пространственной изменчивости данного свойства пористой среды. Их анализ позволяет определить структуру эффективных коэффициентов дисперсии для построения упрощенных аналитических моделей, учитывающих масштабных эффекты при миграции в гетерогенных средах.

1. Общие представления о стохастических транспортных моделях

Возможности описания процессов массопереноса в реальных водоносных горизонтах (полевой масштаб) на основе традиционных, статистически усредненных расчетных моделей с постоянными коэффициентами, в частности, с постоянными коэффициентами микродисперсии (дисперсивности) ограничены. Применение в этих

условиях детерминированных моделей требует нереально большого объема исходной информации, конкретизирующей миграционные и фильтрационные параметры в пределах всей области, на которую распространяется прогноз. Все это обусловило повышенный интерес к анализу миграции в неупорядоченно неоднородных водоносных горизонтах в рамках стохастического подхода (Gelhar, 1993; Rubin, 2003).

Стохастические модели используются для анализа массопереноса как в пористых, так и в трещиноватых коллекторах, для которых характерно наличие гидравлически взаимосвязанных зон с различной геометрией и проницаемостью. Они получили название от применяемых для описания изменчивости фильтрационных свойств пород стохастических процедур (методов, подходов), элементы которых используются также для решения и анализа соответствующих краевых задач массопереноса. При этом изменчивость физических свойств пород (проницаемость, сорбционная способность и др.), определяющая их гетерогенность и неоднородность, не является полностью случайной, но принимается зависящей от проявления корреляционной структуры любого из исследуемых массивов. Коррелируемость параметров определяется самой природой осадконакопления при формировании отложений и их последующего литогенеза. Пространственная корреляционная структура пород описывается с использованием случайных пространственных функций, которые представляют собой вероятностные распределения или статистические моменты.

Наибольший интерес с позиций описания масштабных эффектов при массопереносе представляет анализ пространственной изменчивости поля проницаемости (коэффициента фильтрации), контролирующей флуктуации действительной скорости фильтрации, и как следствие дисперсию вещества. При изучении миграции сорбируемых компонентов важны представления о пространственной изменчивости сорбционных свойств среды, которые также определяют неоднородность поля скоростей массопереноса. Пространственными вариациями других миграционных параметров в подавляющем большинстве случаев пренебрегается.

1.1. Основы геостатистики

Геостатистика традиционно основывается на следующих трех ключевых положениях.

1. Коэффициент фильтрации k (или, в частном случае, проводимость T) является случайной логнормально распределенной величиной, т.е. $Y = \ln k$ подчиняется нормальному (гаусовскому) закону распределения:

$$f_k(k) \equiv f_k(k; \mu_Y, \sigma_Y) = \frac{1}{k\sqrt{2\pi\sigma_Y^2}} \exp\left[-\frac{(\ln k - \mu_Y)^2}{2\sigma_Y^2}\right]. \quad (\text{xx.1})$$

2. Параметры μ_Y и σ_Y^2 , входящие в выражение для функции распределения (1.180), – среднее значение (математическое ожидание) и дисперсия $\ln k$. Они являются достаточными для описания некоррелируемого поля распределения Y .

3. Корреляционная структура массива пород, включающая тренды и повторяемость Y , может быть описана автокорреляционной функцией, которая характеризует коррелируемое поле распределения Y .

Функция $Y = \ln k$ является стационарной (второго порядка). Это значит, что ожидаемое значение Y и его дисперсия являются константами и пространственная ковариация между $Y(x_1)$ и $Y(x_2)$ является функцией $(x_1 - x_2)$, но не функцией значений x_1 и x_2 по отдельности. Эргодичность означает, что, наблюдая пространственные вариации одной реализации стохастического процесса, можно получить представления о статистических свойствах процесса для всего множества реализации. Другими словами, одна реализация стохастического процесса для описания пространственной вариации какого-либо параметра дает тот же результат, что и наблюдения за вариациями этого свойства среды в одной точке пространства при множественных реализациях.

Если значения функции Y_i установлены в n точках, то среднее значение и дисперсия определяются выражениями

$$\mu_Y = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n Y_i, \quad (\text{xx.2})$$

$$\sigma_Y^2 = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_i - \mu_Y)^2. \quad (\text{xx.3})$$

Очевидно, поскольку σ_Y^2 характеризует флуктуации около среднего, то соответствующее значение может рассматриваться как мера степени гетерогенности горизонта: чем больше σ_Y^2 , тем выше пространственные вариации коэффициента фильтрации. С другой стороны, если значения Y определены в ограниченном количестве точек, то среднее значение μ_Y и дисперсия σ_Y^2 (либо σ_Y – среднее квадратическое или стандартное отклонение) могут быть использованы для предсказания вероятных значений Y в точках, где измерения Y не были сделаны. Отношение σ_Y / μ_Y получило название коэффициента вариации, который также используется для оценки степени изменчивости параметров.

Сами по себе значения μ_Y и σ_Y^2 не несут информации о структуре корреляционного случайного поля проницаемости. Для количественного описания корреляции можно использовать ковариационную функцию

$$\text{cov}_Y(h) = \text{cov}_Y [Y(x+h), Y(x)] = \langle (Y(x+h) - \mu_Y)(Y(x) - \mu_Y) \rangle \quad (\text{xx.4})$$

($\langle \rangle$ означает ожидаемое значение), которая на практике рассчитывается по формуле (Deutsch, Journel, 1992):

$$\text{cov}_Y(h) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Y_{x+h} - \mu_Y)(Y_x - \mu_Y). \quad (\text{xx.5})$$

здесь h – фиксированное расстояние, называемое часто «разделительным лагом». Значения ковариационной функции уменьшаются с увеличением h . При $h=0$ ковариационная функция равна дисперсии, σ_Y^2 . Пространственная ковариация – мера постоянства (или, наоборот, непостоянства) фильтрационных свойств среды. Положительная ковариация между двумя точками x и $x+h$ подразумевает, что, если $Y(x)$ выше, чем среднее, ожидается, что $Y(x+h)$ будет также выше среднего. Отрицательная ковариация предполагает обратную тенденцию.

С другой стороны, мерой роста степени разброса точек при увеличении h на графиках рассеяния может служить момент инерции относительно линии 1:1. В этом

случае корреляционная структура может быть описана с помощью (функции-) полувариограммы:

$$\gamma_Y(h) = \frac{1}{2} \langle [Y(x) - Y(x+h)]^2 \rangle, \quad (\text{xx.6})$$

Для построения экспериментальных полувариограмм (далее – вариограмм) используются расчеты по формуле, предложенной Г. Матероном (G. Matheron) в 1962 г. (Deutsch, Journel, 1992; Rubin, 2003):

$$\gamma_Y(h) = \frac{1}{2n(h)} \sum_{i=1}^{n(h)} (Y_{x_i+h} - Y_{x_i})^2, \quad (\text{xx.7})$$

где $n(h)$ – количество пар значений, разделенных расстоянием h ; $\gamma_Y(h)$ – возрастающая на определенном отрезке функция (рис. 1).

Ковариационная функция и вариограмма связаны между собой соотношением

$$\gamma_Y(h) = \sigma_Y^2 - \text{cov}_Y(h). \quad (\text{xx.8})$$

При малых h вариограмма $\gamma_Y(h)$ характеризуется низкими значениями, что указывает на близость значений Y в соседних точках. Для случайного коррелируемого поля увеличение h приводит к росту и последующей стабилизации $\gamma_Y(h)$ вблизи постоянного значения (σ_Y^2) (рис. 1). Это означает, что, начиная с определенных значений разделяющего лага, корреляция между значениями Y отсутствует, и они могут рассматриваться подобно обычным случайным величинам, характеризующим некоррелируемое поле.

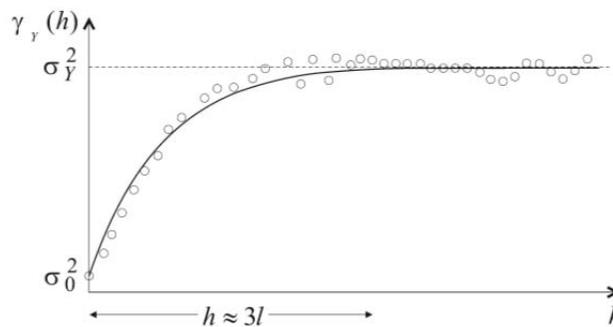


Рис. 1. Экспериментальная (кружки) и модельная (сплошная линия) вариограммы.

Таким образом, вариограмма несет информацию о некоторой масштабной (корреляционной) длине, характеризующей закономерную пространственную изменчивость параметров. Поэтому, если подобрать некоторую аналитическую модель (функцию), аппроксимирующую экспериментальную вариограмму $\gamma_Y(h)$, то появится возможность предсказать пространственную корреляционную структуру изучаемой среды. Если $Y = \ln k$ статистически гомогенна (стационарна), вариограмма зависит только от h .

Среди достаточно большого количества модельных функций, описывающих экспериментальные вариограммы (Rubin, 2003), выделяется экспоненциальная

$$\gamma_Y(h) = \sigma_0^2 + \sigma_Y^2(1 - e^{-h/l_Y}), \quad (\text{xx.9})$$

довольно часто используемая при обосновании параметрического базиса фильтрационных и миграционных задач; здесь l_Y – корреляционный масштаб (характерная длина, при

превышении которой корреляция между значениями рассматриваемого параметра становится несущественной); σ_0^2 – дисперсия, обусловленная эффектом самородков («nagget effect»). Этот эффект подразумевает, что существуют пространственные вариации параметра, которые не охвачены принятым масштабом (интервалом) опробования. Он также задает долю случайной компоненты изменчивости, не описываемую как следует через случайные процессы.

Таким образом, стохастический подход к описанию пространственной структуры фильтрационного поля предполагает представление гидравлической проводимости или коэффициента фильтрации (k) пласта в виде случайной пространственно коррелированной величины, для которой, как правило, принимается логнормальный закон распределения $Y = \ln k$.

Экспоненциально затухающая ковариационная функция в общем трехмерном варианте может быть представлена в виде (Gelhar, Axness, 1983):

$$\text{cov}_Y(\mathbf{h}) = \sigma_Y^2 \exp \left[- \left(\frac{h_1^2}{l_1^2} + \frac{h_2^2}{l_2^2} + \frac{h_3^2}{l_3^2} \right)^{1/2} \right], \quad (\text{xx.10})$$

где \mathbf{h} – некоторый пространственный разделительный вектор (h_1, h_2 и h_3 – его компоненты – разделительные лаги по направлениям); l_1, l_2 и l_3 – корреляционные масштабы проницаемости в горизонтальной плоскости ($l_1 \equiv l_x, l_2 \equiv l_y$) и в вертикальном направлении ($l_3 \equiv l_z$); σ_Y^2 – дисперсия $Y = \ln k$.

Качественно, можно предположить, что корреляционный масштаб связан с характерной длиной элементов фильтрационной неоднородности (например, глинистых линзообразных включений в песчаной толще). Если корреляционные масштабы одинаковы для всех направлений ($l_x = l_y = l_z = l_Y$), то такой стохастический процесс называется статистически изотропным процессом. Если значения проницаемости горизонта коррелируют в одном направлении больше, чем в другом, то мы имеем дело со статистически анизотропной средой. Например, в идеально стратифицированной среде (переслаивание хорошо выдержанных по простиранию песчаных и глинистых слоев) корреляционные масштабы в плане (l_x и l_y) имеют близкие значения, однако они многократно превышают корреляционный масштаб, измеряемый вкrest напластования ($l_x, l_y \gg l_z$). Низкие значения l_z свидетельствуют о резких литологических изменениях в вертикальном направлении. В большинстве практических расчетов полагается $l_x = l_y \gg l_z$.

1.2. Макродисперсия и расчетные (эффективные) коэффициенты дисперсии

Для большинства комплексов пород характерно наличие пропластков, линз и других включений с различной геометрией и проницаемостью, а также зон неоднородности по характеру трещиноватости, случайным образом распространенных по площади и в разрезе. О масштабах дисперсии (в данном контексте – макродисперсии) вещества в водоносных системах неупорядоченного строения можно судить по приведенным в ряде работ результатам оценки в полевых условиях параметра δ_L –

показателя продольного рассеяния. По данным локальных трассерных экспериментов, значения параметра δ_L составляют десятки сантиметров и первые метры, а значения, рассчитанные по результатам обработки опытно-эксплуатационных наблюдений, могут достигать десятков метров. При этом нередко наблюдается примерно линейный рост расчетных значений δ_L с увеличением размера области, охваченной массовым потоком. Аналогично возрастают и расчетные значения показателей поперечного рассеяния δ_T . В целом полученные данные свидетельствуют о существенном различии между масштабами микро- и макродисперсии.

Подходы, направленные на определение эффективных параметров массопереноса, в частности, коэффициентов дисперсии, в предпосылке о стохастическом характере и миграционных процессов, могут подразделяться на численные и аналитические.

Численные подходы предполагают обычно множественную реализацию поля Y с заданной корреляционной структурой и последующим анализом свойств решений соответствующих задач, получаемых на численных моделях. Чаще всего обращаются к так называемому моделированию методом Monte Carlo. В основе этого метода, приложение которого, впрочем, требует больших компьютерных ресурсов, довольно простой принцип. Предполагается, что вероятность распределения переменной (коэффициента фильтрации, например) и ее ковариационная функция известны. Затем осуществляется множественная реализация поля коэффициента фильтрации, которое удовлетворяет со статистической точки зрения принятому закону распределения. Для этого используются специальные генераторы случайных, но коррелируемых в пространстве чисел. Каждая реализация поля коэффициента фильтрации служит основой для решения фильтрационной и миграционной задач (обычно численными методами). Таким образом, получается набор из N численных решений задач, отвечающих N статистическим реализациям. Далее анализируются статистические характеристики решений собственно фильтрационных и миграционных задач на предмет определения средних значений, дисперсии, ковариации, распределений функций напоров и/или концентраций.

Аналитические методы основываются либо на различного рода преобразованиях исходных дифференциальных уравнений, приводящих к их стохастическим аналогам (эйлеров подход), либо на нахождении аналитических функций, описывающих пространственную изменчивость (флуктуации) поля скоростей фильтрации (или статистическую дисперсию фронта смещения), и соответственно дисперсивность массового потока (лагранжев подход). Решения стохастических уравнений могут даваться также в терминах статистических моментов для поля скоростей и концентраций, которые включают стохастические параметры среды. Они могут быть использованы для сопоставления с моментами классических уравнений конвективной дисперсии, что дает основание для анализа поведения коэффициентов эффективной макродисперсии в различных пространственно-временных диапазонах.

Следующие два уравнения показывают различия в математической формализации процессов дисперсии, имеющих место на поровом уровне в однородной среде и в полевом масштабе гетерогенной (неоднородной) среды:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) = 0, \quad (\text{xx.11})$$

$$\frac{\partial \langle C \rangle}{\partial t} + \frac{\partial (u_i \langle C \rangle)}{\partial x_i} + \frac{\partial \langle u_i' C' \rangle}{\partial x_i} - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} + (-\langle u_i' C' \rangle) \right) = 0, \quad (\text{xx.12})$$

где D_{ij} – коэффициент поровой дисперсии (микродисперсии).

Второе уравнение постулирует существование случайных возмущений около ожидаемых значений концентрации $\langle C \rangle$ и скорости фильтрации $\langle u_i \rangle$, вызванных вариациями проницаемости:

$$C = \langle C \rangle + C', \quad u_i = \langle u_i \rangle + u_i', \quad (\text{xx.13})$$

здесь штриховой индекс – возмущение нулевого порядка.

Если при этом допустить, что макродисперсионный поток описывается линейным градиентным законом Фика, то мы вправе записать следующее формальное соотношение (Gelhar, Axness, 1983):

$$-\langle u_i' C' \rangle = D_{ij}^* \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_j} \approx A_{ij} \langle u_j \rangle \frac{\partial \langle C \rangle}{\partial x_i}, \quad (\text{xx.14})$$

где D_{ij}^* – тензор макродисперсии. При описании переноса в гомогенных породах $\langle v_i' C' \rangle = 0$ ($D_{ij}^* = 0$), так что уравнения (xx.11) и (xx.12) становятся идентичными.

Коэффициент A_{ij} получил название коэффициента макродисперсивности. В плановом фильтрационном потоке его продольная и поперечная компоненты в терминах стохастической среды имеют представление

$$A_{11} = \sigma_Y^2 l_x, \quad A_{22} = \frac{\sigma_Y^2}{8} (\delta_L + 3\delta_T), \quad (\text{xx.15})$$

где σ_Y^2 – дисперсия $\ln k$; A_{11} и A_{22} – продольная и поперечная компоненты макродисперсивности; δ_L и δ_T – то же для микродисперсивности (разд. ...).

Уравнения (xx.15) показывают, что микродисперсия не оказывает влияния на величину продольной макродисперсии, в тоже время поперечная макродисперсия контролируется дисперсивностью на микроуровне.

Подставляя (xx.14) в (xx.12), приходим к обобщенной форме уравнения макродисперсии фиковского типа

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{u} \bar{C}}{\partial x_i} - (\delta_{ij} + A_{ij}) \bar{u}_j \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} = 0, \quad (\text{xx.16})$$

используемое для асимптотических режимов миграции (теоретически при $t \rightarrow \infty$).

Уравнение (xx.16) упрощает описание миграции на основе уравнения (xx.12): для этого могут использоваться фундаментальные решения уравнения фиковой дисперсии, полученные для микродисперсии при замене коэффициентов поровой дисперсии (дисперсивности) их макроскопическими аналогами:

$$\delta_{ij}^* = \delta_{ij} + A_{ij}, \quad (\text{xx.17})$$

соответственно

$$D_{ij}^* = \delta_{ij}^* u_j, \quad (\text{xx.18})$$

или для планового потока

$$D_L^* = \delta_{11} + \delta_{11}^* u, \quad D_T^* = \delta_{22} + \delta_{22}^* u, \quad (\text{xx.18a})$$

где $\delta_{11}^* = \delta_L^*$ – продольная макродисперсивность, $\delta_{22}^* = \delta_T^*$ – поперечная компонента макродисперсивности; $u \equiv u_1$ – средняя действительная скорость фильтрации.

В силу высокой чувствительности анализа к исходным предпосылкам схематизации, типа использованных корреляционных функций, а главное, к методам линеаризации базовых интегрально-дифференциальных уравнений для пространственных (вторых) моментов тензоров множества средних концентраций в статистически описываемой среде, полученные результаты (аналитические выражения для коэффициентов макродисперсии) не всегда совпадают. Однотипность выражений сохраняется лишь в предельном случае статистически изотропной среды ($l_x = l_y = l_z = l_Y$) при $\sigma_Y^2 < 1$.

Коэффициенты дисперсивности, рассчитываемые в рамках представлений о фиковом характере миграции, являются в общем случае нестационарными функциями [$\delta = f(t)$, или $\delta = f(x)$]. Так, анализ трехмерного процесса в изотропной стохастической среде (Dagan, 1989) позволил получить выражения для основных компонент коэффициента дисперсии $D_{ij}(t)$ или дисперсивности $\delta_{ij}(t)$. Для начальных моментов времени ($\tau = ut/l_Y \ll 1$, τ – нормированное время) формулы для коэффициентов продольной и поперечной дисперсивности имеют вид:

$$\delta_L = \frac{8}{15} \sigma_Y^2 ut, \quad \delta_T = \frac{1}{15} \sigma_Y^2 ut. \quad (\text{xx.19})$$

Оба коэффициента линейно связаны с σ_Y^2 , не зависят от корреляционного масштаба и растут пропорционально времени, или, поскольку $ut = x$, линейно зависят от расстояния, пройденного концентрационным фронтом в пористой среде:

$$\delta_L = \frac{8}{15} \sigma_Y^2 x, \quad \delta_T = \frac{1}{15} \sigma_Y^2 x. \quad (\text{xx.19a})$$

Тот же результат получен в ряде других работ (Gelhar, Axness, 1983; Gelhar, 1993; Dagan, 1987; Neuman, Zhang, 1990), авторы которых использовали математические приемы, отличные от изложенного.

По прошествии довольно больших периодов времени ($\tau \gg 1$), наблюдается стабилизация коэффициентов дисперсивности, определяемая ранее представленной асимптотикой (xx.15).

В целом эффекты рассеяния вещества в продольном направлении определяются исключительно показателями ковариационной функции и слабо зависят от значений локальной (поровой) дисперсивности (δ_L и δ_T). Это говорит о том, что процесс всецело контролируется флуктуацией поля скоростей фильтрации. В тоже время, обращает на себя внимание микроскопический уровень проявления поперечной дисперсии, значение которой определяется комбинацией локальных компонент δ_L , δ_T и пропорционально σ_Y^2 (xx.15). При $\delta_T = \delta_L$ второе выражение (xx.15) близко к оценке, представленной в работе (Neuman, Zhang, 1990).

$$\delta_T^* = \frac{\sigma_Y^2}{2} \delta_L. \quad (\text{xx.20})$$

Во всех случаях, со временем следует ожидать замедления динамики роста боковых границ ореолов рассеяния: увеличение зоны смешения в направлениях,

ортогональных средней скорости фильтрации, происходит крайне медленно. Это, однако, не означает, что боковой отток вещества пренебрежимо мал: из-за большой площади боковой поверхности ореола через нее при этом может мигрировать основная доля загрязнений (Мироненко, Румынин, 1998). Следует еще раз подчеркнуть, что асимптотическое поведение поперечной дисперсии достигается очень медленно, и на практике весь процесс может протекать в переходной области.

Анализ процессов в трехмерных средах с анизотропной корреляционной структурой показывает, что при $l_z \ll l_x(l_y)$ и $\delta_T l_x \ll l_z^2$ происходит вырождение соответствующих моделей в модели миграции в идеализированных стратифицированных средах, в которых преобладает дисперсионный межслоевой обмен, а конвекция лишь определяет перенос вещества по напластованию. В этом случае для описания начальной и конечной стадий процесса может использоваться диффузионно-конвективная модель с параметрами, определяемыми согласно (Gelhar, 1993):

$$\delta_L = \frac{\sigma_k^2}{k^2} ut \approx \frac{\sigma_k^2}{k^2} x \quad \text{при } t \ll l_z^2 / u\delta_T, \quad (\text{xx.21})$$

$$\delta_L^* = \frac{\sigma_k^2}{k^2} \frac{l_z^2}{3\delta_T} \quad \text{при } t \gg l_z^2 / u\delta_T; \quad (\text{xx.22})$$

здесь σ_k^2 – статистическая дисперсия нормально распределенного коэффициента фильтрации, k – его среднее значение. Для перехода к логнормальному распределению используется соотношение:

$$\frac{\sigma_k^2}{k^2} = e^{\sigma_f^2} - 1. \quad (\text{xx.22a})$$

Однако модель идеально стратифицированной водоносной системы отвечает реальности в относительно редких случаях: сильно завышая продольную дисперсию и приуменьшая роль поперечной, она может приводить к весьма крайним выводам и качественно неверным обобщениям. В этом отношении трехмерные модели дают более «простое» и реальное распределение концентраций, нежели двухмерные (Gelhar, Axness, 1983).

В целом, концепция макропараметров, получаемых из стохастической теории макродисперсии, является весьма продуктивным элементом гидрогеологического анализа, направленного на преодоление масштабных эффектов при построении детерминированных моделей миграции подземных вод с масштабно зависящими коэффициентами дисперсии (разд. 2). Необходимо, однако, отметить, что они отвечают условиям миграции вещества в квазиодномерных стационарных фильтрационных потоках имеющих место в средах, где коэффициент фильтрации представлен стационарной нормально распределенной функцией со сравнительно малой статистической дисперсией, ориентировочно – при коэффициенте $\sigma_Y^2 < 1$. В этот интервал попадает большинство пористых коллекторов. В трещиноватых породах значения σ_Y^2 могут достигать 5–10, что ограничивает, в общем случае, возможности аналитических оценок (Yeh, 1989).

2. Одномерные аналитические модели макродисперсии

Предлагаемые ниже аналитические решения представляют альтернативные стохастическим моделям средства для описания миграции вещества в неоднородных пористых средах, где существует масштабная зависимость дисперсионного рассеяния. Хотя такого рода модели конвективной дисперсии носят эмпирический характер, они могут оказаться полезными для характеристики транспорта, который демонстрирует поведение, зависящее от пространственно-временного масштаба.

Дж. Пикенс и Г. Гризак (Pickens, Grisak, 1981) предложили четыре функции для коэффициента продольной дисперсивности, зависящей от расстояния – линейную, параболическую, асимптотическую и экспоненциальную. Данный тип пространственных функций был впоследствии расширен до функций дисперсии, зависящих от времени (Basha, El-Habel, 1993). Пространственные зависимости для коэффициента $\delta_L(x)$ преобразуется во временную зависимость $\delta_L(t)$ с учетом того, что среднее расстояние переноса, x , связано со временем, t , соотношением $x = ut$, т.е. для коэффициента дисперсивности справедливо приближенное равенство:

$$\delta_L(x) \approx \delta_L(ut). \quad (\text{xx.23})$$

Преимущество такого преобразования состоит в том, что решения для $\delta_L(t)$ имеют более простой вид (Basha, El-Habel, 1993).

Аналитические решения уравнений конвективной дисперсии для различных моделей дисперсивности $\delta_L(x)$ и $\delta_L(t)$ получаются с помощью преобразований Лапласа или/и Фурье; они представлены специальными функциями или интегралами их включающими. В ряде публикаций решения в замкнутой форме получены с помощью power series method. Аналитические решения могут быть использованы в качестве эталона для оценки качества численных решений.

На практике тип функции дисперсивности, $\delta_L = f(x)$ (или $\delta_L = f(t)$) может быть выбран в соответствии с наблюдаемой взаимосвязью между дисперсией точек концентрационного распределения, σ^2 , и средним расстоянием, x (или временем, t), устанавливаемым в результате полевых трассерных (опытных) опробований или данных мониторинга.

Согласно классическим представлениям (Bear, 1972),

$$D_L = \frac{1}{2} \frac{d\sigma^2}{dt}, \quad (\text{xx.24})$$

т.е. при $D_L = \text{const}$ пространственная дисперсия σ^2 [L^2], растет линейно во времени. Тогда, исходя из линейной зависимости между коэффициентом гидродинамической дисперсии, D_L , и действительной скоростью фильтрации, u , можно записать

$$\delta_L u = \frac{1}{2} \frac{d\sigma^2}{dt}. \quad (\text{xx.25})$$

Для средней длины переноса ($x = \bar{x}$) $u = dx/dt$, что позволяет переписать (xx.25) в форме

$$\delta_L = \frac{1}{2} \frac{d\sigma^2}{dx}. \quad (\text{xx.26})$$

В качестве альтернативы пространственной характеристики, σ^2 , может использоваться *дисперсия времени* миграции вещества, σ_τ^2 [T²], на основе регистрации концентрационных точек выходной кривой опыта в точках наблюдения $C(t)$, представляющей функцию плотности вероятности (PDF). В случае фиковой дисперсии, для которой функция плотности вероятности τ является обратной гауссовой, такой анализ основывается на зависимости

$$\delta_L = \frac{u}{2} \frac{d\sigma_\tau^2}{dt}. \quad (\text{xx.27})$$

Представленные соотношения могут использоваться для экспериментального исследования макродисперсии (определения полевых значений дисперсивности), а также для определения вида функциональных зависимостей $\delta_L = f(x)$ или $\delta_L = f(t)$, например:

$$\sigma^2 = 2 \int f(x) dx \quad \text{или} \quad \sigma_\tau^2 = \frac{2}{u} \int f(t) dt. \quad (\text{xx.28})$$

Многочисленные исследования в рамках аналитических построений и численного моделирования миграции в неоднородных средах, имеющих корреляционную структуру поля проницаемости, позволили найти аналитические представления для коэффициента дисперсии (дисперсивности), а также получить выражения для времени, необходимого для достижения асимптотического поведения этого коэффициента.

Аналитические решения играют важную роль, потому что они предлагают фундаментальное понимание физических процессов, предоставляют полезные инструменты для проверки численных данных.

2.1. Решения для уравнений переноса при $D_L = D_L(x)$

Отмеченные особенности процесса массопереноса в пористой среде находят отражение в обобщенном уравнении конвекции и дисперсии:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left[D_L(x) \frac{\partial C}{\partial x} \right] + \lambda RC = 0, \quad (\text{xx.29})$$

где

$$D_L(x) = \delta_L(x)u + D_m, \quad (\text{xx.30})$$

$D_L(x)$ – коэффициент продольной (суммарной) дисперсии, $\delta_L(x)$ – продольная дисперсивность, D_m – коэффициент поровой молекулярной диффузии. Уравнение (xx.29) записано для случая миграции сорбируемого нестабильного (подверженному распаду) компонента; в этом уравнении: R – коэффициент сорбционной задержки, λ – константа распада, u – действительная скорость фильтрации.

Связь между длиной переноса и коэффициентом дисперсии описывается разнообразными математическими зависимостями. Наиболее практически значимыми являются:

– линейная

$$\delta_L = ax; \quad (\text{xx.31})$$

– линейная асимптотическая

$$\delta_L = \begin{cases} ax & x \leq x_0, \\ \delta_L^* & x > x_0; \end{cases} \quad (\text{xx.32})$$

– экспоненциальная

$$\delta_L = a_1 L [1 - \exp(-bx/L)]; \quad (\text{xx.33})$$

– асимптотическая

$$\delta_L = A \left(1 - \frac{B}{x+B} \right); \quad (\text{xx.34})$$

здесь a, a_1, b, x_0, L – постоянные; δ_L^* и A – асимптотические максимумы дисперсивности, B – характерная длина, равная среднему расстоянию переноса, при котором достигается $1/2$ от максимального значения A . Эти параметры характеризуют масштабно-зависимый процесс одномерного рассеяния растворенного вещества. Как будет показано далее, аналитические представления этих параметров могут связываться с автокорреляционной функцией, характеризующей коррелируемое поле распределения Y – дисперсию $\ln k$, σ_Y^2 , и корреляционный масштаб Y, l_Y (см. разд. 1.1).

С полными решениями уравнения (xx.29) для полуограниченной среды ($0 \leq x \leq \infty$) при двухчленном представлении коэффициента дисперсии (xx.30), полученным как для условий постоянной концентрации на входной границе потока ($x = 0$), так и при заданной величине массового потока (т.е. при учете дисперсионной компоненты при $x = 0$), можно ознакомиться в ряде публикаций (Yates, 1990; Yates, 1992; Huang et al., 1994). Авторы отмечают, что присутствие коэффициента молекулярной диффузии, D_m , в зависимости (xx.30) заметно осложняет как сам поиск решений, так и их математическое представление, затрудняя вычислительные процедуры. Такое усложнение мало себя оправдывает, учитывая второстепенную роль диффузии на фоне рассеяния вещества, обусловленного пространственной изменчивостью проницаемости среды. Поэтому в нашем анализе будем использовать сокращенную запись:

$$D_L(x) = \delta_L(x)u. \quad (\text{xx.35})$$

Для практических целей вполне достаточно также ограничиться нулевым начальным условием, условием I рода на входной границе потока и II рода на бесконечном удалении от источника

$$C(x,0) = 0, \quad C(0,t) = C_0, \quad \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{x \rightarrow \infty} = 0. \quad (\text{xx.36})$$

Линейная модель (xx.31). Параметр a характеризует рост коэффициента дисперсии при увеличении длины переноса. Согласно анализу (Yates, 1990; Huang et al., 1994), параметр $a < 1$. Структура параметра a может быть определена в терминах стохастической модели изотропной среды для асимптотики Дагана (xx.19a)

$$a = \alpha \sigma_Y^2, \quad (\text{xx.37})$$

$\alpha = 8/15 \approx 1/2$. В таком представлении линейная модель (xx.31) отвечает начальным этапам миграционного процесса в неоднородной среде ($\tau = ut/l_Y \ll 1$).

Аналогично для стратифицированного пласта, воспользовавшись асимптотиками Гелхара (Gelhar, 1993) (xx.21), получаем

$$a = \frac{\sigma_k^2}{k^2}, \quad t \ll l_z^2 / u \delta_T. \quad (\text{xx.38})$$

В изображениях по Лапласу уравнение (хх.29) принимает вид

$$R(p+\lambda)\tilde{C} + u \frac{d\tilde{C}}{dx} - \frac{d}{dx} \left(axu \frac{\partial \tilde{C}}{\partial x} \right) = 0, \quad (\text{хх.39})$$

а граничное условие (хх.36) –

$$\tilde{C}(0, p) = \frac{C_0}{p}, \quad \frac{d\tilde{C}}{dx}(\infty, p) = 0. \quad (\text{хх.40})$$

Решение (хх.39)–(хх.40) имеет вид (Huang et al., 1996):

$$\tilde{C}(x, p) = \frac{2C_0}{p} (Kx)^{\gamma/2} \frac{K_\gamma(2\sqrt{Kx})}{\Gamma(\gamma)}, \quad (\text{хх.41})$$

где $K = \gamma R(p+\lambda)/u$, $\gamma = 1/a$, K_γ – функция Бесселя, $\Gamma(\gamma)$ – гамма функция.

Обращение (хх.41) в область оригинала дает (Huang et al., 1996):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{\Gamma(\gamma)} \int_{\varepsilon/t}^{\infty} \tau^{\gamma-1} \exp \left[- \left(\tau + \frac{\gamma R \lambda x}{u \tau} \right) \right] d\tau, \quad (\text{хх.42})$$

где $\varepsilon = R\gamma x/u$, $\Gamma(\gamma) = \int_0^{\infty} y^{\gamma-1} e^{-y} dy$.

При $t \rightarrow \infty$ решение (хх.42) имеет следующую стационарную асимптотику:

$$C(x) = 2C_0 \frac{(\zeta x)^{\gamma/2}}{\Gamma(\gamma)} K_\gamma(2\sqrt{\zeta x}), \quad (\text{хх.43})$$

где $\zeta = \gamma R \lambda / u$.

Позже была получена более простая форма решения уравнения (хх.29) при краевых условиях (хх.36) (Pang, Hunt, 2001):

$$C(x, t) = \frac{C_0}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t \exp \left(-\lambda \tau - \frac{\gamma R x}{u \tau} \right) \left(\frac{\gamma R x}{u \tau} \right)^\gamma \frac{d\tau}{\tau}. \quad (\text{хх.44})$$

Такая форма решения позволяет трансформировать его для случая источника с экспоненциально затухающей интенсивностью

$$C(x, t) = \frac{C_0 \exp(-\lambda t)}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t \exp \left(-\frac{\gamma R x}{u \tau} \right) \left(\frac{\gamma R x}{u \tau} \right)^\gamma \frac{d\tau}{\tau}, \quad (\text{хх.45})$$

а также на случай пакетного поступления вещества в пласт продолжительностью t_0 :

$$C(x, t) = \frac{C_0}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t \exp \left(-\lambda \tau - \frac{\gamma R x}{u \tau} \right) \left(\frac{\gamma R x}{u \tau} \right)^\gamma \frac{d\tau}{\tau}, \quad 0 < t \leq t_0,$$

$$C(x, t) = \frac{C_0}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t \exp \left(-\lambda \tau - \frac{\gamma R x}{u \tau} \right) \left(\frac{\gamma R x}{u \tau} \right)^\gamma \frac{d\tau}{\tau} -$$

$$- \frac{C_0}{\Gamma(\gamma)} \int_0^{t-t_0} \exp \left(-\lambda \tau - \frac{\gamma R x}{u \tau} \right) \left(\frac{\gamma R x}{u \tau} \right)^\gamma \frac{d\tau}{\tau}, \quad t_0 < t < \infty. \quad (\text{хх.46})$$

С.Р. Йейтс (Yates, 1990) сравнил решение, полученное для функции дисперсивности, зависящей от расстояния (хх.31), где $a = 0,1$, и классическое решение задачи конвективной дисперсии с постоянным коэффициентом дисперсии при граничном условии I рода ($C_0 = \text{const}$ и пакетный входной сигнал). Результаты показывают, что классическое уравнение конвективной дисперсии может дать кривую той же формы, что и

кривая, полученная в результате использования модели дисперсии, зависящей от масштаба. Однако, если классическое решение с параметрами дисперсивности, полученными при малых x (например, $x = 100$ м), используется для прогнозирования поведения концентрационных кривых на больших расстояниях (например, $x = 500$ м), наблюдается значительное отклонение от результатов решения, учитывающего масштабный эффект. Наиболее значимая разница заключается в том, что классическое уравнение переноса растворенного вещества дает более высокий пик концентрации и меньшее дисперсионное рассеяние.

Линейная асимптотическая модель (xx.32). Данная модель предполагает, что дисперсия линейно увеличивается с расстоянием до тех пор, пока не пройдено некоторое расстояние, x_0 , после которого дисперсия достигает предельного асимптотического значения $D_L^*(\delta_L^*)$ (xx.18a). Как и в случае линейной модели, параметр x_0 может быть определен в терминах стохастической модели при асимптотических представлениях Дагана (xx.19a) и (xx.15, первое уравнение) исходя из равенства значений дисперсивностей на пересечении двух участков графика $\delta(x)$: $ax_0 = \delta_L^* = \sigma_Y^2 l_Y$ ($a = \alpha \sigma_Y^2$), откуда

$$x_0 = \frac{l_Y}{\alpha} \approx 2l_Y. \quad (\text{xx.47})$$

В таком представлении линейная асимптотическая модель (xx.32) отвечает длительным этапам миграционного процесса в неоднородной среде ($\tau = ut/l_Y \gg 1$).

Аналогично для стратифицированного пласта в случае использования асимптотики Гелхара (Gelhar, 1993) (xx.21) и (xx.22) равенство $ax_0 = \delta_L^* = \frac{\sigma_k^2 l_z^2}{k^2 3\delta_T}$ позволяет получить

$$x_0 = \frac{l_z^2}{3\delta_T}. \quad (\text{xx.48})$$

В работе (Huang et al., 1996) было получено соответствующее аналитическое решение задачи для одномерной дисперсии при тех же краевых условиях (xx.36). В этом случае уравнение (xx.29) можем быть фрагментировано на два уравнения

$$R \frac{\partial C_1}{\partial t} + u \frac{\partial C_1}{\partial x} - \frac{\partial}{\partial x} \left(axu \frac{\partial C_1}{\partial x} \right) + \lambda RC_1 = 0, \quad 0 \leq x \leq x_0; \quad (\text{xx.48})$$

$$R \frac{\partial C_2}{\partial t} + u \frac{\partial C_2}{\partial x} - D_L \frac{\partial^2 C_2}{\partial x^2} + \lambda RC_2 = 0, \quad x > x_0, \quad (\text{xx.48})$$

где C_1 и C_2 – концентрации в области 1, где происходит линейное увеличение дисперсивности, и области 2, где имеет место постоянное значение коэффициента дисперсивности δ_L^* ($D_L = \delta_L^* u$ – асимптотическое значение коэффициента продольной дисперсии – см. xx.18a).

Проблема сводится к сопряжению конвективно-дисперсионного процесса в двух областях. Мы можем предположить, что область 1 ($0 \leq x < x_0$) является эффективно полубесконечной и, следовательно, концентрация в области 1 не зависит от того, что происходит ниже по потоку в области 2. При этом допущении граничное условие для (xx.48) на выходе сводится к (xx.36) – $C_1 \equiv C$:

Получив таким образом решение для C_1 , решение для транспорта в области 2 может быть получено с использованием концентрация области 1 при $x = x_0$, как входное условие для области 2. Для этого можно принять либо непрерывность концентрации на границе раздела, т. е.

$$C_1(x_0, t) = C_2(x_0, t), \quad (\text{xx.49})$$

или условие неразрывности двух массовых потоков

$$\left(-D_L \frac{\partial C_1}{\partial x} + uC_1 \right) \Big|_{x=x_0} = \left(-D_L \frac{\partial C_2}{\partial x} + uC_2 \right) \Big|_{x=x_0}. \quad (\text{xx.49a})$$

В такой постановке решение в изображениях по Лапласу и в оригинале для области 1 в точности отвечает ранее полученным решениям (xx.41) и (xx.42). Для изображения концентрации C_2 имеем

$$\tilde{C}_2(x, p) = \frac{2C_0}{p} \exp[r(x-x_0)] (Kx_0)^{\gamma/2} \frac{K_\gamma(2\sqrt{Kx_0})}{\Gamma(\gamma)}, \quad (\text{xx.50})$$

где $r = \frac{u - \sqrt{u^2 + 4D_L R(p + \lambda)}}{D_L}$, $K = \gamma R(p + \lambda)/u$, $\gamma = 1/a$, K_γ – модифицированная функция Бесселя (нецелого порядка), $\Gamma(\gamma)$ – гамма функция.

Используя свойства свертки и сдвига преобразования Лапласа, мы получаем следующее решение для $x > x_0$

$$C_2(x, t) = \frac{C_0 \eta_0^\gamma}{\Gamma(\gamma)} \int_0^t B(x-x_0, t-\tau) \frac{\exp[-(\eta_0/\tau + \lambda\tau)]}{\tau^{\gamma+1}} d\tau, \quad (\text{xx.51})$$

где $B(x, t) = \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(u-\mu)x}{2D_L}\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx-\mu t}{2\sqrt{D_L Rt}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left[\frac{(u+\mu)x}{2D_L}\right] \operatorname{erfc}\left(\frac{Rx+\mu t}{2\sqrt{D_L Rt}}\right)$,

$\mu = \sqrt{u^2 + 4\lambda RD_L}$, $\eta = R\gamma x/u$, $\eta_0 = R\gamma x_0/u$.

Стационарная асимптотика для (xx.51) имеет вид (Huang et al., 1996):

$$C(x) = 2C_0 \exp\left[\frac{x-x_0}{2D_L}(u-\mu)\right] \frac{(\lambda\eta_0)^{\gamma/2}}{\Gamma(\gamma)} K_\gamma(2\sqrt{\lambda\eta_0}). \quad (\text{xx.51a})$$

Использования условия неразрывности двух массовых потоков (xx.49a) позволяет получить решение для C_2 только в изображениях по Лапласу, $\tilde{C}_2(x, p)$ (Huang et al., 1996).

К. Хуанг с соавторами (Huang et al., 1996) провел сравнение модели линейной асимптотической дисперсии (LAD) с линейной моделью дисперсии (LD) С.Р. Йейтса (Yates, 1990) и классической моделью CDE с постоянной дисперсией. Их результаты показывают, что существует гораздо более сильный эффект, зависящий от масштаба, когда параметры a и x_0 увеличиваются в значении. Однако было обнаружено, что для одного и того же значения асимптотической дисперсии, влияние a на расчетную концентрацию распространение относительно невелико на больших расстояниях. По сравнению с линейной дисперсионной моделью, модель LAD всегда давала одно и то же концентрационное распределения, полученные с помощью линейной модели Йейтса, когда $0 \leq x \leq x_0$, но существенно отклоняясь от LD модели Йейтса для $x > x_0$. Они также обнаружили, что прогнозируемые профили концентраций, полученные с помощью модели

CDE, в большинстве случаев отличались в значительной степени от рассчитанных с помощью модели LAD, а также с помощью линейной модели Йейтса, за исключением больших времен, когда рассматривалось значение асимптотической дисперсии.

Экспоненциальная модель (хх.33). Масштаб дисперсии определяется тремя коэффициентами: a_1 , b и L . Структура этих коэффициентов может быть определена в терминах стохастической модели, $a_1 = \sigma_Y^2$, $L = l_Y$, $b = \alpha$, что позволяет переписать (хх.31) в виде:

$$\delta_L = \sigma_Y^2 l_Y [1 - \exp(-\alpha x / l_Y)], \quad (\text{хх.52})$$

Выражение (хх.52) дает две асимптотики Дагана: при $x \rightarrow 0$, когда $\tau = ut / l_Y \ll 1$, (хх.19а), при $x \rightarrow \infty$, когда $\tau = ut / l_Y \gg 1$, (хх.15). Таким образом, все три модели для δ_L являются параметрически согласованными. Из (хх.52) следуют примерные критерии применимости моделей: $x \ll 0.2l_Y$ – линейная, $x \gg 5l_Y$ – линейная асимптотическая.

Аналогично для стратифицированного пласта (хх.21) получаем $a_1 = \sigma_k^2 / k^2$, $L = l_z^2 / 3\delta_T$, $b = 1$. Тогда

$$\delta_L = \frac{\sigma_k^2}{k^2} \frac{l_z^2}{3\delta_T} [1 - \exp(-3\delta_T x / l_z^2)]. \quad (\text{хх.53})$$

Примерные критерии применимости моделей: $x \ll 0.03l_z^2 / \delta_T$ – линейная, $x \gg l_z^2 / \delta_T$, $x \gg 5l_Y$ – линейная асимптотическая.

Представим исходное конвективно-дисперсионное уравнение (хх.29) в безразмерных координатах

$$\tau = ut / RL, \quad \eta = x / L, \quad \beta = \lambda LR / u, \quad (\text{хх.54})$$

и преобразуем его в область изображений по Лапласу:

$$\frac{D(\eta)}{uL} \frac{d^2 \tilde{C}}{d\eta^2} + \left(\frac{D'(\eta)}{u} - 1 \right) \frac{d\tilde{C}}{d\eta} - (\beta + p) \tilde{C} = 0, \quad (\text{хх.55})$$

где $D'(\eta) = dD/d\eta$, p – комплексный параметр преобразования Лапласа по безразмерному времени.

Пусть $\tilde{C}(\eta) = \tilde{C}[\xi(\eta)]$, где $\xi(\eta)$ – новая произвольная функция от координаты η .

Тогда уравнение (хх.55) принимает вид

$$\frac{D(\eta)\xi'(\eta)^2}{uL} \frac{d^2 \tilde{C}}{d\xi^2} + \left[\xi'(\eta) \left(\frac{D'(\eta)}{u} - 1 \right) \frac{D(\eta)}{uL} \xi''(\eta) \right] \frac{d\tilde{C}}{d\xi} - (\beta + p) \tilde{C} = 0. \quad (\text{хх.56})$$

Использование (хх.56) предполагает исключение η из преобразований $\tilde{C}(\eta) = \tilde{C}[\xi(\eta)]$ и $D(\eta) \xi(\eta)$. Если $\xi(\eta) = Fe^{b\eta}$, где $F = 1 + D_m / (auL)$, используется в (хх.56) вместе с $D(\eta)$, то (хх.56) преобразуется к виду

$$\xi(1 - \xi) \frac{d^2 \tilde{C}}{d\xi^2} - \left(1 - \frac{1}{abF} \right) \xi \frac{d\tilde{C}}{d\xi} + \frac{\beta + p}{ab^2 F} \tilde{C} = 0. \quad (\text{хх.57})$$

Решение (хх.57) при граничных условиях

$$\tilde{C}(\xi_0, \tau) = \frac{C_0}{p}, \quad \tilde{C}(\xi, 0) = 0, \quad (\text{хх.58})$$

и $\xi_0 = F$ имеет вид (Yates, 1992):

$$\frac{\tilde{C}(\xi, p)}{C_0} = \left(\frac{F}{\xi}\right)^\gamma \frac{{}_2F_1(\gamma, \gamma+1; \gamma-\mu+1; \xi^{-1})}{{}_2F_1(\gamma, \gamma+1; \gamma-\mu+1; F^{-1})p}, \quad (\text{хх.59})$$

где ${}_2F_1$ – гипергеометрическая функция; γ , μ и ν – параметры этой функции;

$$\gamma = \frac{-1 + \sqrt{1 + 4aF(p + \beta)}}{2abF}, \quad \mu = \frac{-1 - \sqrt{1 + 4aF(p + \beta)}}{2abF}.$$

Функция имеет три регулярных сингулярных точки при 0, 1 и ∞ и 24 решения.

Решение сходится при всех $D_m > 0$ поскольку $1/\xi < 1$. При $D_m = 0$ поскольку $\xi \rightarrow 1$ сходимость зависит от модельных параметров. Обращение функции $\tilde{C}(\xi, p)$ в область оригинала дано в работе (Yates, 1992).

Решения (хх.42), (хх.51), (хх.59) могут быть распространены на случай постоянной начальной концентрации ($C(0, x) = C_i > 0$), пакетного запуска и «затухающего» условия на границе $C(t, 0) = C_0 \exp(-\lambda t)$ (реализовано в программном комплексе).

2.2. Пример (Вилькина и др. 2023)

В процессе изысканий на площадке строительства АЭС Пакш II было проведено 36 опытных одиночных откачек из скважин на аллювиальный водоносный горизонт, сложенный крупно- и среднезернистыми песками (рис. 2). Мощность слоя песков достигает 15 м, ниже залегает высоко-проводящая толща, сложенная гравием.

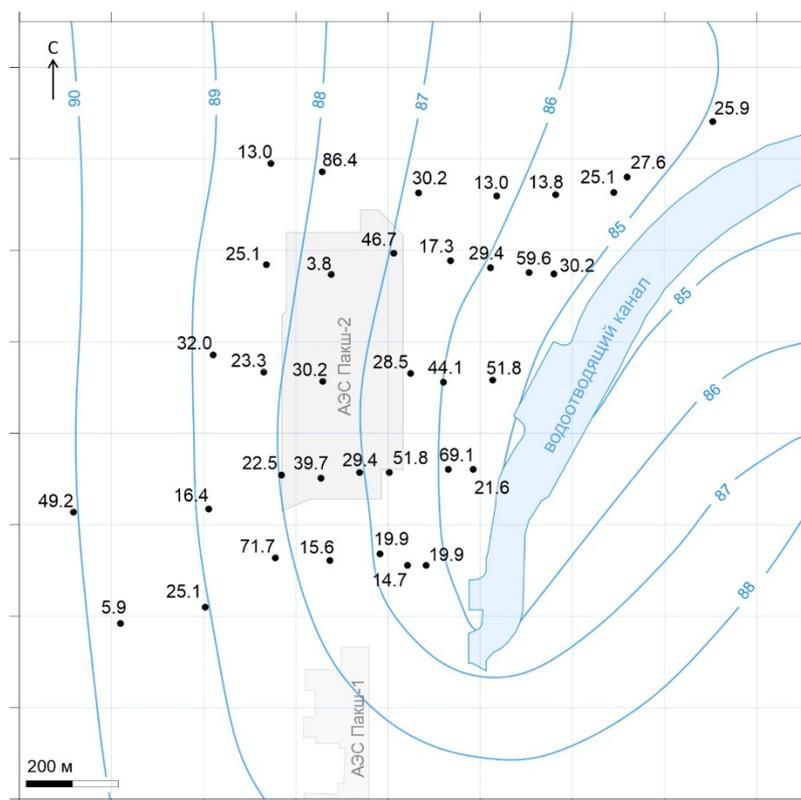


Рис. 2. Карта гидроизогипс аллювиального водоносного горизонта и коэффициенты фильтрации по данным одиночных откачек.

Результаты определения коэффициента фильтрации приведены к основанию натурального логарифма и представлены на графике функции плотности вероятности (рис. 3).

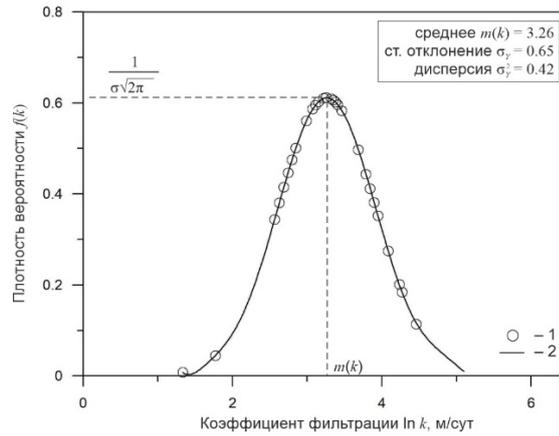


Рис. 3. График функции плотности вероятности (1 – замеренный коэффициент фильтрации; 2 – функция плотности вероятности). $m \equiv \mu_Y$.

Как видно из графика, полученные значения обладают свойством логнормального Гауссова распределения и описываются выражением (хх.1). Основные статистические параметры изучаемой толщи принимают следующие значения (в логарифме): дисперсия σ_Y^2 равна 0.42, среднее μ_Y равно 3.26. Большое значение дисперсии обусловлено высокой неоднородностью изучаемой толщи. Так, в пределах одного квадратного километра коэффициент фильтрации варьирует от 3.8 до 86.4 м/сут (рис. 2).

На основе опытных данных была построена экспериментальная неориентированная вариограмма (рис. 4). В качестве шага (лага) вариограммы принималось среднее расстояние между скважинами, принятое равным 50 м. Экспериментальные данные логарифмов коэффициента фильтрации были аппроксимированы теоретической гауссовой вариограммой. Теоретическая вариограмма принимает следующие значения: дисперсия σ_Y^2 равна 0.42, радиус вариограммы (range) равен 105 м. Отметим, что численная дисперсия, полученная из функции плотности вероятности, равна дисперсии вариограммы.

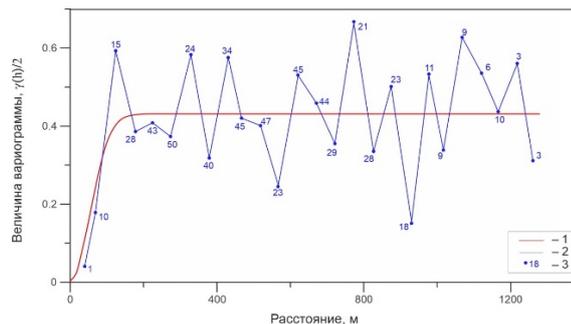


Рис. 4. Экспериментальная и теоретическая вариограммы (1 – теоретическая вариограмма; 2 – экспериментальная вариограмма; 3 – количество пар скважин, использованных для расчета каждой точки экспериментальной вариограммы).

Проведенный теоретический анализ и полученные экспериментальные результаты позволяют проанализировать влияние стохастической структуры аллювиального водоносного горизонта на характер дисперсии концентрационных фронтов в случае одномерной миграции в плоскопараллельном фильтрационном потоке. Пусть скорость Дарси $v = 0.15$ м/сут, активная пористость $n = 0.25$ ($u = 0.6$ м/сут), мигрирует инертный стабильный компонент. Из анализа вариограммы $\sigma_Y^2 = 0.42$, $l_Y = 35$ м (корреляционный масштаб l_Y равен 1/3 радиуса вариограммы).

При построении графиков $C(x)$ (расчетные моменты времени 10, 500 и 5 000 сут) использовались две функциональные зависимости $\delta_L(x)$: линейная (хх.31) и линейная асимптотическая (хх.32) (рис. 5). Расчеты дополнены $\delta_L = \text{const}$: $\delta_L = \sigma_Y^2 l_Y = 14.7$ м – эта величина является асимптотическим значением в зависимости (хх.32). Структура параметра a в (хх.31) и (хх.32) была определена в терминах стохастической модели изотропной среды для асимптотики Г. Дагана (хх.19а) $a = \alpha \sigma_Y^2 = 0.224$ (при $\alpha = 8/15$). Для линейной асимптотической модели параметр x_0 был определен исходя из равенства значений дисперсивностей на пересечении двух участков графика $\delta_L(x)$: $a x_0 = \delta_L^* = \sigma_Y^2 l_Y$ ($a = \alpha \sigma_Y^2$), откуда $x_0 = l_Y / \alpha = 65.63$ м.

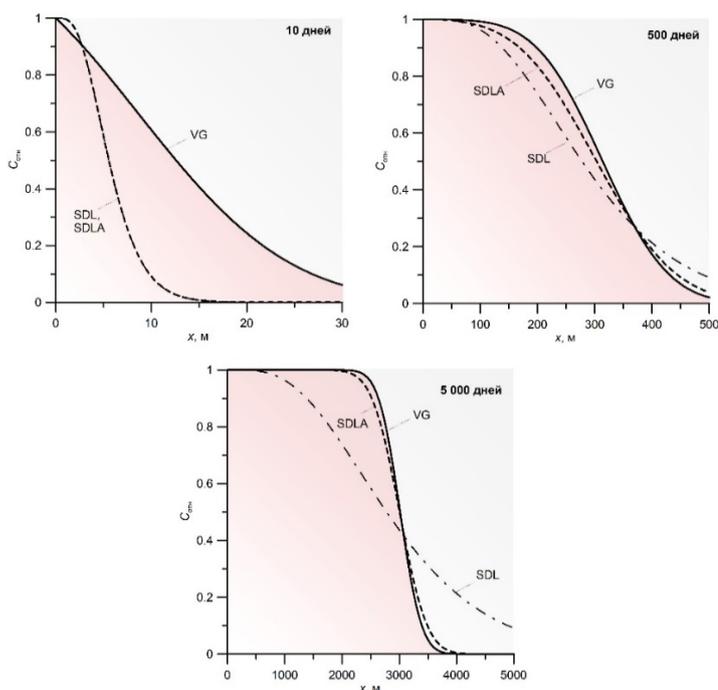


Рис. 5. Влияние вида функциональной зависимости $\delta(x)$ на характер концентрационного фронта вещества в одномерном потоке: штрихпунктирная кривая – линейная функция SDL (хх.31), штриховая кривая – линейная асимптотическая SDLA (хх.32), сплошная кривая – решение с постоянными коэффициентами дисперсивности.

Как видно из графиков, на начальных этапах миграции линейная и линейная асимптотическая модели дают весьма близкие результаты, которые, однако, сильно отличаются от расчетов с использованием решения с постоянным асимптотическим коэффициентом дисперсивности $\delta_L = \sigma_Y^2 l_Y$. Со временем происходит сближение кривых распределения с этим решением. На больших временах фронт загрязнения для линейной модели выглядит значительно более размытым, нежели при использовании моделей с постоянным коэффициентом дисперсивности или линейных моделей с асимптотикой.

При пространственных масштабах переноса загрязнения в аллювиальном водоносном горизонте долины р. Дунай на изучаемом участке строительства Пакш II, измеряемых сотнями метров и временем до нескольких лет, рассеяние вещества контролируется масштабными эффектами – зависимостью коэффициента дисперсии от расстояния или времени нахождения загрязнения в подземных водах. Анализ вариограммы коэффициента фильтрации позволяет предположить, что предпочтительной для миграционных расчетов должна быть линейная модель для коэффициента $\delta_L(x)$ (хх.31). Ее близость с линейной асимптотической моделью (хх.32)

объясняется сопоставимостью значений пороговой характеристики x_0 с длиной фронта переноса за рассмотренный промежуток времени (около трех лет).

Наконец, зависимости (хх.32) и (хх.33) при коэффициентах σ_Y^2 и l_Y , найденных при помощи стохастического анализа опытных откачек на площадке АЭС Пакш II, не противоречат общему тренду опытного материала, обобщенного в статье (Schulze-Makuch, 2005) (рис. 6). Однако, как видно, следует ожидать более высокую степень рассеяния загрязняющего вещества в аллювиальном горизонте на участке Пакш II по сравнению рассчитанным по «среднестатистическим» данным.

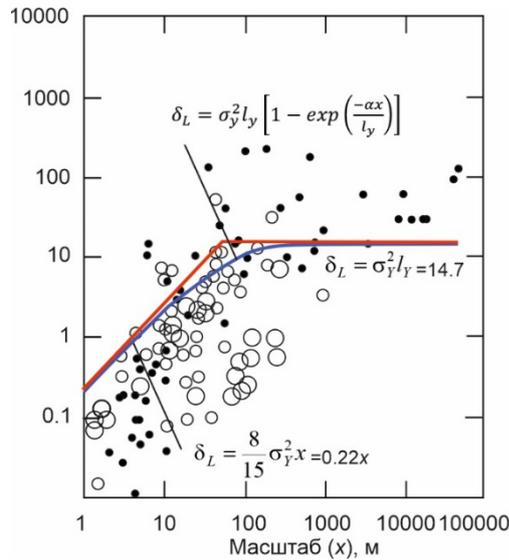


Рис. 6. Влияние масштаба миграционного процесса на эффективное значение продольной дисперсивности, δ_L для неконсолидированных разностей пород (Schulze-Makuch, 2005) (размер кружков пропорционален надежности определений δ_L).

2.3. Решения для уравнений переноса при $D_L = D_L(t)$

При коэффициенте дисперсии, меняющемся во времени, обобщенное уравнение миграции равномерно сорбируемого нестабильного компонента имеет вид:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - D_L(t) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \lambda RC - q(x,t) = 0, \quad (\text{хх.60})$$

где

$$D_L(t) = \delta_L(t)u + D_m; \quad (\text{хх.61})$$

здесь R – фактор сорбционной задержки, λ – константа распада, $\dot{q} = dq/dt$ скорость поступления компонентов в пласт на единицу объема [$\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$].

Используя преобразование (хх.23), представим базовые модели временной изменчивости коэффициента продольной дисперсии, $D_L(t)$, в форме (Basha, El-Habel, 1993):

– линейная модель

$$D_L(t) = D_0 \frac{t}{\tau} + D_m; \quad (\text{хх.62})$$

– экспоненциальная модель

$$D_L(t) = D_0 \left[1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau}\right) \right] + D_m; \quad (\text{xx.63})$$

– асимптотическая модель

$$D_L(t) = D_0 \frac{t}{t + \tau} + D_m; \quad (\text{xx.64})$$

здесь D_0 – максимальное значение гидродинамической компоненты коэффициента продольной дисперсии, D_m – коэффициент молекулярной диффузии. В работе (Basha, El-Nabel, 1993) под константой τ понимается некоторое среднее время достижения фиксированных значений коэффициента D_L ($D_0 + D_m$, $0.5D_0 + D_m$ или $0.632D_0 + D_m$ – для линейной, экспоненциальной или асимптотической моделей).

Можно показать, подобно тому, как это было сделано ранее, что для водоносных горизонтов, изменчивость проницаемости которых описывается стохастическими функциями Дагана (xx.17) – (xx.19) и Гелхара (xx.21)–(xx.22), для коэффициентов D_0 и τ справедливы соотношения:

– стохастически изотропный пласт

$$D_0 = \sigma_Y^2 l_Y u, \tau = \frac{l_Y}{\alpha u}, \alpha \approx \frac{1}{2}; \quad (\text{xx.65})$$

– стратифицированный пласт

$$D_0 = \frac{\sigma_k^2 l_z^2}{k^2 3\delta_T} u, \tau = \frac{l_z^2}{3\delta_T u}. \quad (\text{xx.66})$$

Зададимся следующими безразмерными характеристиками процесса:

$$X = \frac{x}{L}, U = \frac{uL}{D_0}, \frac{T}{t} = \frac{\lambda}{\mu} = \frac{K}{\tau} = \frac{D_0}{L^2 R}, D = \frac{D_L}{D_0}, \varepsilon = \frac{D_m}{D_0}, \frac{\dot{Q}}{Q} = \frac{D_0}{L^2}, \quad (\text{xx.67})$$

где L – характерное расстояние.

Уравнение (xx.60) принимает вид:

$$\frac{\partial C}{\partial T} + U \frac{\partial C}{\partial X} - D \frac{\partial^2 C}{\partial X^2} + \mu C - \dot{Q} = 0. \quad (\text{xx.68})$$

Подстановка

$$C = C_1 \exp(-\mu T) \quad (\text{xx.69})$$

в уравнение (xx.68) преобразует его к виду

$$\frac{\partial C_1}{\partial T} + U \frac{\partial C_1}{\partial X} - D \frac{\partial^2 C_1}{\partial X^2} - \dot{Q} \exp(\mu T) = 0. \quad (\text{xx.70})$$

В подвижных координатах,

$$\eta = X - UT, \quad (\text{xx.71})$$

уравнение имеет вид

$$\frac{\partial C_1}{\partial T} = D \frac{\partial^2 C_1}{\partial \eta^2} + \dot{Q} \exp[\mu T]. \quad (\text{xx.72})$$

Наконец, задавшись новой временной переменной,

$$\xi = \xi(T) = \int_0^T D(\omega) d\omega, \quad (\text{xx.73})$$

(ω – переменная интегрирования) получаем неоднородное уравнение типа уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial C_1}{\partial \xi} = \frac{\partial^2 C_1}{\partial \eta^2} + \frac{\dot{Q} \exp[\mu T]}{D}, \quad (\text{xx.74})$$

в котором последний член представляет переменную во времени функцию источника.

Решение уравнения при нулевом начальном условии,

$$C_1(\eta, 0) = 0, \quad (\text{xx.75})$$

имеет вид (Basha, El-Habel, 1993)

$$C = \int_0^T \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\dot{Q} \exp[-\mu(T-T_0)]}{[4\pi(\xi-\xi_0)]^{1/2}} \exp\left[-\frac{[X-X_0-U(T-T_0)]^2}{4(\xi-\xi_0)}\right] dX_0 dT_0, \quad (\text{xx.76})$$

где $\xi_0 = \xi(T_0)$ (см. xx.73).

Интегральное решение (xx.76) может быть использовано для нахождения частных решений для различных форм временных функций $D_L(t)$ (xx.62)–(xx.64) (Basha, El-Habel, 1993). Далее в качестве базовых приведем решения, полученные для импульсного источника – мгновенный импульс массой M в сечении $X_0 = 0$ в момент $T_0 = 0$

$$\dot{Q} = \frac{M}{RnL} \delta(X_0) \delta(T_0), \quad (\text{xx.77})$$

и при непрерывном поступлении вещества в пласт с постоянной интенсивностью в сечение $X_0 = 0$

$$\dot{Q} = C_0 U \delta(T_0), \quad (\text{xx.78})$$

δ – дельта-функция Дирака, M [ML⁻²].

Эти решения представлены в виде функций от безразмерных характеристик (xx.67), нормированных относительно комплексных параметров, характеризующих изменчивость фильтрационных свойств водоносного горизонта (xx.65)–(xx.66).

Линейная модель (xx.62). Интегрирование (xx.73) дает $\xi = T^2 / 2K + \varepsilon T$, тогда:

– для импульсного источника

$$C = \frac{M}{nLR[4\pi(T^2/2K + \varepsilon T)]^{1/2}} \exp\left[-\mu T - \frac{(X-UT)^2}{4(T^2/2K + \varepsilon T)}\right]; \quad (\text{xx.79})$$

– для постоянного источника

$$\frac{C}{C_0} = \int_0^T \frac{U \exp[-\mu(T-T_0)]}{[4\pi(T^2 - T_0^2)/2K + \varepsilon(T-T_0)]^{1/2}} \exp\left[-\frac{[X-U(T-T_0)]^2}{4[(T^2 - T_0^2)/2K + \varepsilon(T-T_0)]}\right] dT_0. \quad (\text{xx.80})$$

Экспоненциальная модель (xx.63). Интегрирование (xx.73)

дает $\xi = (1 + \varepsilon)T + K \exp(-T/K) - K$, тогда:

– для импульсного источника

$$C = \frac{M}{nLR[4\pi[(1 + \varepsilon)T + K \exp(-T/K) - K]]^{1/2}} \times \exp\left[-\mu T - \frac{(X-UT)^2}{4[(1 + \varepsilon)T + K \exp(-T/K) - K]}\right]; \quad (\text{xx.81})$$

– для постоянного источника

$$\frac{C}{C_0} = \int_0^T \frac{U \exp[-\mu(T - T_0)]}{\{4\pi[(1 + \varepsilon)(T - T_0) + K \exp(-T/K) - K \exp(-T_0/K)]\}^{1/2}} \times \exp\left[-\frac{[X - U(T - T_0)]^2}{4[(1 + \varepsilon)(T - T_0) + K \exp(-T/K) - K \exp(-T_0/K)]}\right] dT_0. \quad (\text{xx.82})$$

Асимптотическая модель (xx.64). Интегрирование (xx.73) дает $\xi = T - K \ln(1 + T/K) + \varepsilon T$, тогда:

– для импульсного источника

$$C = \frac{M}{nLR[4\pi[(1 + \varepsilon)T - K \ln(1 + T/K)]]^{1/2}} \exp\left[-\mu T - \frac{(X - UT)^2}{4[(1 + \varepsilon)T - K \ln(1 + T/K)]}\right]; \quad (\text{xx.83})$$

– для постоянного источника

$$\frac{C}{C_0} = \int_0^T \frac{U \exp[-\mu(T - T_0)]}{\{4\pi[(1 + \varepsilon)(T - T_0) - K \ln(1 + T/K) + K \ln(1 + T_0/K)]\}^{1/2}} \times \exp\left[-\frac{[X - U(T - T_0)]^2}{4[(1 + \varepsilon)(T - T_0) - K \ln(1 + T/K) + K \ln(1 + T_0/K)]}\right] dT_0. \quad (\text{xx.84})$$

Литература

Basha, H.A., El-Habel, F.S. 1993. Analytical solution of one dimensional time-dependent transport equation. Water Resources Research, Vol. 29, No. 9, p. 3209–3214.

Bear J. Dynamics of fluids in porous media. New York. 1972.

Dagan, G. Flow and Transport in Porous Formations. Berlin, N. Y. Springer-Verlag Heidelberg, 1989. 465 p.

Dagan, G. Theory of solute transport by groundwater // Ann. Rev. Fluid Mechanic. 1987. Vol. 19. P. 183–215.

Deutsch, C., Journel, A. GSLIB, Geostatistical Software Library and User's Guide, Oxford University Press., 1992. 340 p.

Fetter, C.W. 1993. Contaminant Hydrogeology. Macmillan Publishing Company, New York.

Gao, G., Zhan, H., Feng, S., Fu, B., Huang, G. 2012. A mobile-immobile model with an asymptotic scale-dependent dispersion function. J. Hydrol. 424–425 (2012): 172–183

Gelhar, L.W. Stochastic subsurface hydrology. Prentice-Hall Inc, Englewood Clift, New Jersey. USA, 1993. 390 p.

Gelhar, L.W., Axness C.L. Three-dimensional stochastic analysis of macrodispersion in aquifers // Water Res. Res. 1983. Vol. 19. N 1. P. 161–180.

Huang, K., van Genuchten, M.T., Zhang R. 1996. Exact solutions for one-dimensional transport with asymptotic scale-dependent dispersion. Appl. Math. Modelling. Vol. 20, p. 298–308.

Neuman, Sh. P., Zhang, Y.K. A quasi-linear theory of Non-Fickian and Fickian subsurface dispersion // Water Res. Res. 1990. Vol. 26. N 5. P. 887–902.

Pang, L., Hunt, B. 2001. Solutions and verification of a scale-dependent dispersion model. *Journal of Contaminant Hydrology*. 53: 21–39.

Pickens, J.F., Grisak, G.E., 1981b. Modeling of scale-dependent dispersion in hydrogeologic systems. *Water Resour. Res.* 17 (6), 1701–1711.

Rubin, Y. *Applied Stochastic Hydrogeology*. Oxford University Press Inc. New York. 2003. 391 p.

Schulze-Makuch, D. 2005. Longitudinal dispersivity data and implications for scaling behavior, *Ground Water*, 43(3), 443–456, doi:10.1111/j.1745-6584.2005.0051.x.

Yates, S.R. 1990. An analytical solution for one-dimensional transport in heterogeneous porous media. *Water Resources Research*. Vol. 26, No. 10, pp. 2331–2338.

Yates, S.R. 1992. An analytical solution for one-dimensional transport in porous medium with an exponential dispersion function, *Water Resources Research*. Vol. 28, No. 8, 2149–2154. doi:10.1029/92WR01006.

Yeh T.C. Jim. A review of the scale problem and application of stochastic methods to determine groundwater travel time and path. 1989, University of Arizona // Techn. Rep. No. HWR 89-010. 240 p.

Zech, A., Attinger, S., Cvetkovic, V., Dagan, G., Dietrich, P., Fiori, A., Rubin, Y., Teutsch, G. 2015. Is unique scaling of aquifer macrodispersivity supported by field data? *Water Resour. Res.* 51 (9), 7662–7679.

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

Вилькина М.В., Никуленков А.М., Румынин В.Г., Синдаловский Л.Н. Влияние изменчивости проницаемости аллювиальных отложений на дисперсию вещества в подземных водах (долина р. Дунай, участок строительства АЭС Пакш II). Конференция МГУ, 2023.