

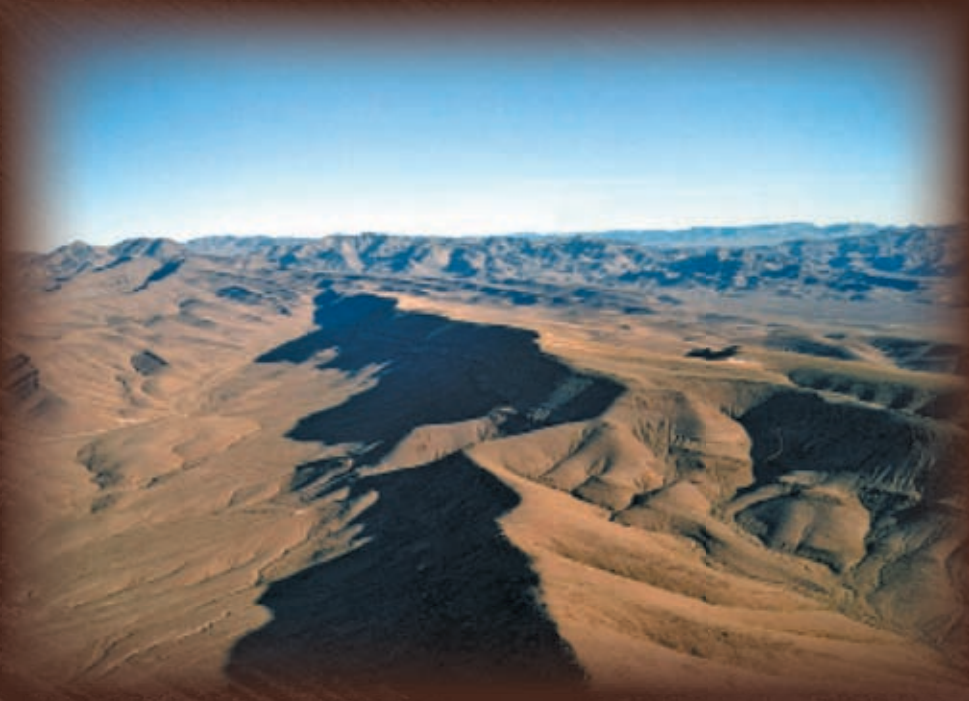


ИБРАЭ

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

В. М. Головизнин, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев,
И. А. Короткин, И. Л. Драников

АНОМАЛЬНАЯ ДИФFUЗИЯ РАДИОНУКЛИДОВ В СИЛЬНОНЕОДНОРОДНЫХ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ ФОРМАЦИЯХ



НАУКА

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК

Институт проблем безопасного развития атомной энергетики

*В. М. Головизнин, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев,
И. А. Короткин, И. Л. Драников*

**АНОМАЛЬНАЯ ДИФфуЗИЯ РАДИОНУКЛИДОВ
В СИЛЬНОНЕОДНОРОДНЫХ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ
ФОРМАЦИЯХ**

Под редакцией
члена-корреспондента РАН
Л. А. Большой

Москва Наука 2010

УДК 621.039

ББК 31.4

А69

Рецензенты:

доктор физико-математических наук *М. Ф. Иванов*,
доктор технических наук *С. В. Антипов*

Аномальная диффузия радионуклидов в сильнонеоднородных геологических формациях / В. М. Головизнин, П. С. Кондратенко, Л. В. Матвеев и др. ; под. ред. чл.-кор. РАН Л. А. Большова ; Ин-т проблем безопасного развития атомной энергетики РАН. — М. : Наука, 2010. — 342 с. : ил. — ISBN 978-5-02-037607-6 (в пер.).

В монографии представлены некоторые наиболее перспективные физические и математические модели, исследованные в ИБРАЭ РАН в рамках работы по разработке новых технологий для оценки безопасности захоронения радиоактивных отходов в геологических формациях. Для описания неклассического, аномального переноса радионуклидов в сильнонеоднородных трещиноватых средах предложены модели дробной диффузии, стохастической адвекции, диффузии по перколяционному кластеру и др. Приведены вычислительные методики и результаты численных расчетов, представлен обзор результатов полевых и лабораторных экспериментов.

Для научных работников, а также аспирантов и студентов, специализирующихся в области моделирования безопасного захоронения радиоактивных отходов.

Anomalous Radionuclide Diffusion in Highly Heterogeneous Geological Formations [in Russian] / V. M. Goloviznin, P. S. Kondratenko, L. V. Matveev et al. ; ed. by L. A. Bolshov ; Nuclear Safety Institute (IBRAE) RAS. — Moscow : Nauka, 2010. — 342 p. : ill. — ISBN 978-5-02-037607-6 (bound).

In the monograph some of the most perspective physical and mathematical models that were investigated at NSI RAS in the framework of new technique development for safety evaluation of radioactive waste disposal in geological formations are presented. In order to describe non-classical anomalous radionuclide transport in highly heterogeneous porous media the models of fractional diffusion, stochastic advection, diffusion in percolation cluster, etc. are suggested. Computational methods and results of numerical calculations are given. In addition, a review of field and laboratory experiment results is presented.

The assumed target for specialists and students in the field of modelling of safety evaluation of radioactive waste.

ISBN 978-5-02-037607-6

© Институт проблем безопасного развития атомной энергетики РАН, 2010

© Коллектив авторов, 2010

© Редакционно-издательское оформление. Издательство «Наука», 2010

Содержание

Содержание	3
Введение.....	7
Литература	31
Глава 1. Аномальная диффузия в простых физических моделях.....	42
1.1. Модель случайной адвекции. Нулевая средняя скорость.....	42
1.1.1. Постановка задачи	42
1.1.2. Масштабный анализ	44
1.1.3. Общие закономерности поведения концентрации	46
1.1.4. Асимптотические профили концентрации	52
1.2. Прямое численное моделирование стохастической адвекции.....	56
1.2.1. Генерация случайных соленоидальных полей скорости с заданной корреляцией в случае двух пространственных измерений	58
1.2.2. Алгоритм численного решения двумерного уравнения конвективного переноса.....	63
1.2.3. Задача о стохастической адвекции примеси	74
1.3. Случайная адвекция при наличии диффузии и дрейфа	95
1.3.1. Формулировка задачи.....	96
1.3.2. Диаграммная техника	97
1.3.3. Роль случайной диффузии	104
1.3.4. Случайная адвекция при наличии дрейфа	105
1.4. Диффузия в регулярно-неоднородной среде: задача Дыхне	119
1.4.1. Постановка задачи	119
1.4.2. Качественный анализ	121
1.4.3. Одиночная трещина. Количественный анализ.....	123
1.4.4. Системы трещин.....	130
1.5. Диффузия по перколяционному кластеру	136
1.5.1. Постановка задачи	136
1.5.2. Анализ поведения концентрации примеси	139
1.5.3. Выводы.....	143
1.6. Флуктуационные эффекты и перенормировка источника в сильнонеоднородных средах	143
Литература	148

Глава 2. Прямое численное моделирование аномальной диффузии	151
2.1. Стохастический подход к моделированию аномальной диффузии	151
2.1.1. Алгоритм генерации случайных величин со степенными тяжелыми хвостами.....	153
2.1.2. Генератор серий устойчивых в широком смысле случайных величин	154
2.1.3. Скорость сходимости генератора строго устойчивых случайных величин	156
2.1.4. Стохастическая одномерная нестационарная модель процесса распространения примеси с тяжелыми хвостами в распределении.....	160
2.1.5. Двумерные и трехмерные стохастические модели случайных блужданий	162
2.1.6. Некоторые статистические закономерности фрактальных полетов Леви	167
2.2. Элементы дробного интегро-дифференциального исчисления. Дробная диффузия	169
2.2.1. Определение Вейля	169
2.2.2. Определение Грюнвальда — Летникова.....	170
2.2.3. Определение Римана — Лиувилля.....	170
2.2.4. Примеры производных дробного порядка	171
2.2.5. Модель дробной диффузии	172
2.2.6. Вывод уравнения дробной диффузии. Способ Эйлера.....	176
2.3. Нестационарная одномерная модель диффузии с дробной производной и численные методы решения	180
2.3.1. Метод Фурье	181
2.3.2. Конечно-разностный метод	181
2.3.3. Метод сплайн-аппроксимаций	183
2.3.4. Вариант двумерной модели с дробной производной по пространству.....	186
2.3.5. Сравнение стохастической модели и модели дробной диффузии	186
Выводы по разделам 2.1—2.3	187
2.4. Физические приближения и дифференциальные математические модели просачивания влаги сквозь ненасыщенную трещиноватую геологическую среду с низкой проницаемостью.....	189
2.4.1. Введение в теорию перколяции	190
2.4.2. Просачивание влаги в зоне аэрации.....	196

2.4.3. Просачивание влаги в ничем не заполненную пористую среду	200
2.4.4. Просачивание влаги по перколяционным решеткам	200
2.4.5. Взаимодействие между кластерами различных решеток и однородной слабопроницаемой матрицей	203
2.4.6. Двойная пористость, двойная проницаемость	204
2.4.7. Перколяционная решетка в квазиоднородной матрице	204
2.5. Одномерные модели просачивания на базе балансно-характеристических разностных схем.....	205
2.5.1. Одномерное приближение	205
2.5.2. Балансно-характеристическая разностная схема для простейшего нелинейного закона сохранения.	205
2.5.3. Монотонность и вычислительная устойчивость	208
2.5.4. Согласованное задание начальных данных.....	209
2.5.5. Примеры тестовых расчетов	210
2.5.6. Скалярный закон сохранения с функцией потоков, зависящей от координат	216
2.5.7. Примеры тестовых расчетов	218
2.5.8. Задача об одномерном просачивании жидкости в пустую (ничем не заполненную) пористую среду с учетом ограничивающих связей	220
2.5.9. Задача о просачивании жидкости в пустую (заполненную вакуумом) пористую среду с учетом капиллярных сил	227
2.5.10. Одномерная модель протекания жидкости в двухпористую среду с двойной проницаемостью	230
2.6. Двумерная модель протекания жидкости в пористую пустую среду.....	232
2.6.1. Двумерная постановка задачи	232
2.6.2. Дискретная модель	233
2.6.3. Протекание по двумерным перколяционным решеткам. Гидростатическое приближение	241
2.6.4. Тестовые задачи	243
Выводы по разделам 2.3—2.6	250
Литература	252
Глава 3. Обратные задачи по идентификации параметров аномальной диффузии	257
3.1. Предпосылки для решения обратной задачи	259
3.1.1. Обобщенная постановка обратной задачи	260
3.1.2. Подходы к решению обратной задачи.....	261
3.2. Искусственные нейронные сети	265

3.2.1. Основные понятия.....	265
3.2.2. Классификация ИНС.....	269
3.2.3. Алгоритмы обучения нейронных сетей	272
3.3. Обратная задача по идентификации основных параметров модели дробной диффузии в одномерном случае	286
3.3.1. Постановка обратной задачи	286
3.3.2. Методика решения обратной задачи.....	287
3.3.3. Определение параметров дробной диффузии для точечного источника	287
3.3.4. Альтернативный способ определения параметров дробной диффузии для точечного источника	293
3.3.5. Построение сети, способной определять параметры дробной диффузии для произвольных распределений концентрации	298
3.3.6. Рекомендации по определению параметров дробной диффузии	300
3.3.7. Исследование влияния количества обучающих примеров на точность определения параметров дробной диффузии.....	308
3.3.8. Исследование влияния шума на точность определения параметров дробной диффузии	310
3.4. Обратная задача по идентификации основных параметров дробной диффузии в двумерном случае	313
3.4.1. Постановка обратной задачи	313
3.4.2. Методика решения обратной задачи.....	315
3.4.3. Исследование различных способов представления информации на входе нейронной сети	315
3.4.4. Исследование влияния формы профиля концентрации на решение обратной задачи	319
3.4.5. Исследование влияния количества обучающих примеров на решение обратной задачи	321
3.5. Обратная задача по идентификации основных параметров стохастической модели распространения радионуклидов в сильнонеоднородных средах	324
3.5.1. Одномерный случай	324
3.5.2. Двумерный случай	337
Литература	342

Введение

Атомная энергетика: перспективы. Развитие экономики любой страны в огромной степени зависит от наличия энергии. Избыток энергии обеспечивает промышленный рост, а с ростом производства и повышением жизненного уровня увеличивается потребление энергии.

Долгосрочное наращивание производства энергии за счет традиционных источников органического топлива возможно в первую очередь путем увеличения относительной и абсолютной добычи угля, поскольку мировых запасов нефти и газа при нынешних темпах потребления хватит лишь на несколько десятилетий. Этот путь потребует изменения соотношения потребления природных ресурсов в большинстве развитых стран в пользу угля. Но здесь возникают три серьезные проблемы: транспортная (территориально запасы угля распределены крайне неравномерно), экологическая (накопление отходов, в частности золы, выбросы в атмосферу вредных газов и возрастающие темпы сжигания кислорода), техническая (примемлемое решение проблемы получения жидкого топлива и газа из угля).

Ресурсы возобновляемых источников энергии (гидроэнергетики, морских приливов и отливов, энергии морских волн, солнечной, ветровой, геотермальной энергетике) недостаточны для покрытия стремительно растущих потребностей человечества, так как характеризуются чрезвычайно низкой интенсивностью поступающей энергии и в большинстве районов Земли в настоящее время экономически нерентабельны.

Решение энергетических проблем человечества возможно на основе развития ядерной энергетике. Как известно, имеются две принципиальные возможности получения ядерной энергии: в реакции деления и в реакции синтеза. Ядерная энергетика сегодняшнего дня развивается только на базе атомных электростанций (АЭС) с реакторами деления, главным образом на тепловых нейтронах, использующими в качестве ядерного горючего только один изотоп урана — ^{235}U . Изотоп ^{238}U , составляющий основную часть природного урана (более 99,3%), используется незначительно. С учетом не только надежно известных, но и предполагаемых ресурсов урана ядерная энергетика с реакторами на тепловых нейтронах обеспечена энергоресурсами на 50—100 лет, т. е. по запасам примерно сопоставима с энергетикой на органическом топливе и не может обеспечить создание мировой энергетике на длительное время (несколько столетий). Однако существует несколько возможных стратегий развития топливных ресурсов ядерной энергетике [1], которые решают эту проблему.

В основе стратегий первой группы лежит совершенствование реализованных в настоящее время так называемых открытых топливных циклов без регенерации ядерного горючего, основанных на использовании ^{235}U (совместно с ^{238}U и ^{232}Th). Топливным циклом обычно называют всю последовательность повторяющихся производственных процессов в топливно-энергетическом комплексе начиная с добычи топлива и кончая удалением отходов. Основное направление научно-технического поиска в развитии стратегий первой группы связано с повышением глубины выгорания делящегося материала (как ^{235}U , так и образующегося в процессе облучения плутония и ^{233}U). Главный их недостаток — увеличение затрат и масштабов добычи сырья, необходимость строительства обогатительных заводов и специальных хранилищ для длительного хранения отработавшего топлива.

В основе стратегий второй группы, которых придерживается и Россия, лежит переход к так называемым замкнутым (или в значительной мере замкнутым) топливным циклам, предполагающим создание производств по регенерации отработавшего в тепловых реакторах горючего с возвратом в цикл. При этом регенерацию целесообразно организовать в реакторах нового типа — на быстрых нейтронах, в которых коэффициент регенерации может достигать единицы и более. В результате ядерная энергетика будет надежно обеспечена ресурсами. Кроме того, с помощью реакторов на быстрых нейтронах можно «выжигать» долгоживущие радионуклиды, которые являются самой неприятной частью радиоактивных отходов.

Полномасштабное развитие ядерной энергетики может решить проблемы покрытия мирового топливно-энергетического баланса в течение многих столетий без каких-либо ограничений — естественно, при обеспечении безопасной работы АЭС и успешном решении экологических проблем, прежде всего проблемы радиоактивных отходов.

Радиоактивные отходы. Современные сложности развития ядерной энергетики связаны как с внешними факторами, обусловленными общественным мнением, так и с внутренними проблемами. Более глубокие причины замедленного развития кроются в самой ядерной энергетике и связаны с отсутствием практического решения ряда задач, в первую очередь с отставанием развития топливной инфраструктуры и трудностями в сфере захоронения высокоактивных отходов [2—4].

Главное возражение противников ядерной энергетики основано на том, что при работе реакторов АЭС в ядерном топливе образуется значительное количество продуктов деления урана и плутония (осколков). Они классифицируются по периоду полураспада $T_{1/2}$ и видам излучения. Существуют короткоживущие и долгоживущие продукты деления. Короткоживущие

имеют значения $T_{1/2}$ от нескольких секунд до десятков часов. Примерно через десять значений $T_{1/2}$ они практически полностью распадаются. Нам больше интересуют долгоживущие продукты деления, представляющие значительную радиационную опасность. Кроме того, при эксплуатации АЭС, как и в любом промышленном производстве, помимо продуктов деления образуется некоторое количество отходов. Значительная их часть имеет наведенную активность, возникшую в результате активации нейтронами конструкционных материалов, теплоносителя и воздуха, заполняющего шахту реактора. Эти отходы возникают в связи с необходимостью замены различных внутрикорпусных устройств датчиков контроля с наведенной активностью, замены фильтров водяного теплоносителя первого контура, содержащих радиоактивные продукты коррозии, дезактивации загрязненного оборудования и производственных помещений и т. д. Все это ведет к появлению твердых, жидких и газообразных радиоактивных отходов. Таким образом, в результате работы АЭС имеются отработавшее ядерное топливо с высокой радиоактивностью и радиоактивные отходы [5—6].

Образование радиоактивных отходов — неотъемлемое свойство ядерных технологий, а безопасное обращение с ними — важная часть проблемы безопасности ядерной энергетики. Основная задача здесь состоит в том, чтобы исключить распространение в окружающей среде радиоактивных веществ, образующихся при работе атомных станций, предотвратить их воздействие на человека и природу при хранении, переработке и перевозке.

Вопросы обращения с отработавшим ядерным топливом и высокоактивными отходами приобрели актуальность еще к середине 60-х годов прошлого века и являются одной из наиболее серьезных проблем во всех странах, использующих ядерные энергетические технологии. В ближайшие десятилетия наиболее реальным технически достижимым методом, способным обеспечить изоляцию отработавшего ядерного топлива и остеклованных высокоактивных отходов от окружающей среды в течение 10 тыс. лет и более, является удаление этих ядерных отходов в глубокозалегающие породы — гранит, глину, соль, туф.

Решение о переработке или окончательном захоронении отработавшего ядерного топлива зависит в основном от затрат на ядерный топливный цикл. Экономический анализ замкнутого (с переработкой отработавшего топлива и последующим возвращением его в цикл) и открытого (с прямым удалением отработавшего топлива без переработки) ядерных топливных циклов в Европе показал некоторое превышение затрат в замкнутом цикле по сравнению с открытым. Тем не менее ряд стран (Россия, Великобритания, Франция, Япония), учитывая экологическое преимущество (снижение объема и радиоактивности отходов при захоронении после переработки)

и возможность рециклирования извлеченных плутония и урана, приняли стратегию замкнутого цикла. США, Канада, Швеция и другие страны предпочли открытый цикл и имеют программы строительства хранилищ для удаления отработавшего ядерного топлива в геологических формациях. Начало эксплуатации геологических хранилищ ожидается в США (Yucca Mountain, штат Невада) не ранее 2010 г., в Швеции — в 2015 г., в Финляндии (Олкилуото) — в 2020 г.

Отметим, что даже в случае реализации замкнутого цикла проблема удаления радиоактивных отходов все же сохраняется.

Накопление больших объемов радиоактивных отходов и отработавшего ядерного топлива из тепловых реакторов поставило вопрос о выработке и реализации долгосрочной стратегии обращения с отходами и в России. В ближайшее время предполагается определить места сооружения крупных могильников для централизованного хранения долгоживущих высокоактивных отходов. Их создание позволит решить на самом современном уровне проблему обращения с отходами ядерной энергетики в стране.

Несмотря на интенсивные исследования и большие капиталовложения в разработку и строительство хранилищ, проблема высокоактивных отходов считается сейчас одной из самых сложных в атомной энергетике. При анализе возможности строительства долговременных хранилищ радиоактивных отходов в геологических формациях принципиальным является вопрос экологической безопасности таких захоронений. Необходимы надежные оценки скорости миграции радионуклидов в сильнонеоднородных средах с полным и неполным влагонасыщением. Многие нуклиды, содержащиеся в продуктах переработки ядерного топлива, имеют очень большой период полураспада, исчисляемый сотнями и тысячами лет, а для распада трансурановых нуклидов (актинидов) требуется время порядка миллиона лет. Понятно, что сегодня у людей нет опыта контроля над какими-либо техническими устройствами в течение столь длительного периода. Многочисленные исследования показывают, что протекание процессов в сильнонеоднородных геологических структурах носит совершенно необычный, аномальный характер, и классические оценки приводят к значительным отличиям от опытных данных.

Решить указанную проблему можно с помощью надежного прогнозирования поведения радионуклидов в подземном хранилище. Один из подходов к решению этой задачи заключается в построении математических моделей, адекватно описывающих перенос радионуклидов в сильнонеоднородных, неупорядоченных геологических структурах.

Исследования протекания влаги и переноса примеси в сильнонеоднородных геологических структурах. Работы такого рода широко проводятся [7] и приобрели сейчас особое значение в связи с разработкой проектов создания площадок для захоронения радиоактивных отходов. В последнее время у специалистов сложилось мнение, что процессы, протекающие в сильнонеоднородных неупорядоченных средах, какими являются наиболее перспективные для захоронений консолидированные трещиноватые горные породы, не могут адекватно описываться классической моделью адвекции-дисперсии, основанной на законах Дарси и Фика.

В публикуемой в последнее время литературе имеются материалы различных исследований, в которых так или иначе обнаруживаются аномальные свойства неоднородной среды в отношении фильтрации и переноса. Сюда входят лабораторные эксперименты с образцами малых размеров, различные полевые исследования трещиноватых водоносных слоев, а также непосредственные исследования геометрических свойств сетей трещин, которые являются основными каналами фильтрации в наиболее интересных случаях. Характер переноса примесей в фильтрационном потоке определяется пространственными флуктуациями скорости и тесно связан со структурой пор и каналов. Поэтому характеристики натуральных сетей трещин дают информацию о характере переноса в этих сетях. По этой же причине к интересным для нас полевым исследованиям помимо собственно трассерных экспериментов были отнесены гидравлические испытания характеристик среды, которые также определяются геометрической структурой проводящих каналов.

Значительная часть полевых экспериментов, обзор которых дан ниже, проведена на насыщенных трещиноватых водоносных слоях. Хотя фильтрация в ненасыщенных породах имеет существенные особенности, ее основные свойства, определяемые неоднородностью и неупорядоченностью самой среды, должны проявляться и в этом случае.

Лабораторные эксперименты. Аномальная диффузия. Хорошо известно, что процесс проникновения влаги в пористые материалы за счет капиллярных сил носит диффузионный характер и описывается уравнением диффузии, в котором коэффициент диффузии, вообще говоря, есть функция насыщенности. В однородной проницаемой среде этот коэффициент не зависит от координат. В этом случае в отсутствие влияния гравитационных сил (речь идет об образцах небольшого размера и/или горизонтальном направлении проникновения жидкости) и при соответствующих граничных условиях на поверхности образца ($s = 0$ при $t = 0$ и $s = 1$ при $t > 0$), насыщенность s в образце может зависеть от координаты

и времени при одномерном распространении только как $s(x/t^{1/2})$. В частности, полное количество жидкости, впитавшейся в образец за время t , будет пропорционально $t^{1/2}$.

В неоднородной пористой среде, какой фактически является любой реальный материал, характер распространения жидкости может существенно измениться. Имеются данные специальных лабораторных экспериментов по пропитке водой таких материалов, как кирпич и известняк [8]. Предварительно высушенные образцы приводились в контакт с водой одной из поверхностей, и пространственный профиль насыщенности внутри образца прецизионно измерялся с помощью метода ядерного магнитного резонанса. Результаты измерений показали, что в упомянутых реальных материалах диффузия воды имеет аномальный характер. Экспериментальная зависимость насыщенности от координаты и времени может быть представлена как функция от x/t^α , где $\alpha \neq 0,5$. Оцененное по экспериментальным данным значение показателя α оказалось примерно равным 0,6. Таким образом, при впитывании влаги в реальные материалы имеет место так называемая супердиффузия (аномальная диффузия).

В [9] дана численная интерпретация этих результатов. Моделирование диффузионного впитывания осуществлялось с помощью двумерной модели сеточных автоматов (lattice gas automaton). Принципиальным для этой модели является учет неоднородности среды — в модели однородной среды аномальной диффузии не наблюдалось. Наряду с неоднородностью, по утверждению авторов, принципиальна также сильная зависимость проницаемости среды от насыщенности. При этом супердиффузия наблюдается, если проницаемость растет с увеличением насыщенности ($\partial D / \partial s > 0$). Этот случай реализовывался в описанных экспериментах и в расчетах [8; 9]. В противоположном случае ($\partial D / \partial s < 0$) должна иметь место субдиффузия, т. е. $\alpha < 0,5$. В качестве иллюстрации такого вывода приводятся результаты диффузионного эксперимента в условиях $\partial D / \partial s < 0$ [10].

Природа наблюдаемой аномальной диффузии воды в пористые материалы детально неясна. Можно отметить, что модельная неоднородность среды, которая вводилась в численные расчеты, не имела фрактального характера. К сожалению, длительность наблюдения в экспериментах и в расчетах не позволяет утверждать, что супердиффузионный режим с $\alpha > 0,5$ является предельным режимом при больших x и t . И в экспериментах с обоими материалами, и в численных расчетах величина α , вообще говоря, не оставалась постоянной, и наблюдалась тенденция к уменьшению α и приближению к 0,5. Но даже если наблюдавшийся в экспериментах

режим является переходным, учет существования такого режима принципиально важен для оценки скорости проникновения влаги в реальные материалы.

В [11] исследовалась адвекция-диффузия в искусственной пористой среде, представляющей насыпку мелких стеклянных пористых шариков. Вода прокачивалась сквозь трубку, заполненную такой средой, с постоянной скоростью, и в течение некоторого времени прослеживалась эволюция распределения концентрации протонов, поляризованных в момент t магнитным импульсом. Профиль концентрации поляризованных протонов измерялся методом ядерного магнитного резонанса через определенные промежутки в течение интервала, меньшего времени релаксации поляризации. В определенных режимах течения при промежуточных числах Пекле обнаружено негауссовское поведение профиля концентрации, что связано с сильной неоднородностью скорости течения между шариками и в порах внутри шариков.

Можно отметить еще ряд экспериментов, в которых наблюдалось нефиковский (non-Fickian) характер диффузии растворенных в жидкости трассеров при фильтрации ее через сильнонеоднородные пористые среды. К ним можно отнести эксперимент [12] по изучению фильтрации через искусственную неоднородную среду в виде слоя неоднородно перемешанных стеклянных шариков разных размеров.

Большое количество лабораторных экспериментов проведено с целью исследования протекания через отдельные насыщенные водой натуральные трещины [13—18]. В [19—21] исследовалось протекание воды через насыщенные образцы натуральных трещин. В [21] использовалась реплика натуральной трещины из прозрачного материала, что позволило визуализировать течение и исследовать его в естественном режиме неполного насыщения, возникающем при подаче воды на входное сечение трещины.

Течение воды в реальных трещинах существенно отличается от течения между двумя гладкими параллельными плоскостями. Сильнонерегулярная поверхность стенок трещины может приводить к анизотропии потока, а также к нарушению известного «кубического закона». При изменении расстояния между двумя стенками общая проницаемость образца меняется быстрее, чем пропорционально кубу расстояния, как это должно быть для гладких плоскостей [15]. Нерегулярная шероховатость стенок трещин приводит к тому, что даже в малых масштабах (5—40 см) поток проявляет стохастические свойства, в нем наблюдаются предпочтительные пути, когда до 90% потока проходит через 5—20% сечения на выходе [21; 22]. В этих условиях можно ожидать аномальной дисперсии переносимых примесей [23].

Полевые эксперименты. Наибольший интерес представляют полевые эксперименты по изучению фильтрации и распространения примесей в подземных водах. Они проводятся при решении задач, связанных с фильтрацией воды при поливах, задач оценки загрязнения и очистки грунтовых вод, водоснабжения, разработки нефтяных и газовых месторождений, а также специально для характеристики площадок, предназначенных для захоронения радиоактивных отходов [24].

Наиболее распространенной методикой исследования фильтрационных свойств геологических пород являются гидравлические испытания, проводимые на скважинах или группах скважин, а также испытания с использованием трассеров.

Важное место в исследованиях свойств водоносных слоев (aquifer) занимает изучение характеристик самой вмещающей пористой среды. Для трещиноватых сред такие исследования проводятся как в лабораторных условиях, так и непосредственно на местах.

Исследования структуры системы трещин. Перколяционные среды. В последнее время появилось много сообщений об исследованиях геометрических характеристик сети трещин с непосредственным наблюдением следов выхода трещин на поверхность трещиноватой породы либо с изучением пересечения трещин с внутренней поверхностью скважин с помощью специальной техники [25; 26].

Последние исследования статистики трещин в горных породах (распределения длин, апертур, ориентаций и т. д.), как правило, показывают, что сети трещин могут быть представлены как фрактальные объекты и характеризоваться распределениями степенного типа, т. е. распределениями, не имеющими характерного пространственного масштаба. «Безмасштабность» распределений косвенно подтверждается механическими соображениями, согласно которым явления образования и роста трещин в твердом теле не зависят от какого-либо пространственного масштаба.

В обзоре [26] показано, что наблюдаемые сети трещин в широком диапазоне масштабов усреднения обладают фрактальными свойствами. Приведенные в [26] гистограммы частоты появления фрактального индекса демонстрируют, что для двумерных сечений трехмерных сетей трещин значения индекса могут пробегать все значения от 1 до 2. Наиболее часто встречающиеся значения близки к 1,5 либо к 2. Первое значение соответствует либо однородным сеткам трещин, либо перколяционным кластерам в двумерной геометрии. Значение из второго диапазона соответствует двумерным кластерам, являющимся проекцией трехмерных перколяционных кластеров [27].

Теория перколяции [27—30] является наиболее подходящим инструментом для исследования сетей трещин: благодаря фрактальной структуре перколяционных кластеров они представляют собой хорошую модель сети трещин.

Важнейшим с точки зрения водопроницаемости свойством сети трещин в непроницаемых (или почти непроницаемых) породах является их связность, взаимные соединения. Даже густая сеть трещин может быть непроницаемой для влаги, если отдельные трещины не соединены между собой.

В теории перколяции свойства проницаемости определяются порогом перколяции. Особый интерес в этой связи представляют состояния перколяционной среды вблизи порога перколяции. Во многих случаях (по крайней мере, для трещин, возникших от разгрузки напряжений в блоках горных пород) есть основания считать, что эта сеть находится в состоянии, близком к порогу (с проводящей стороны от порога). В механике разрушения предполагается, что разгрузка напряжений происходит в момент, когда сеть трещин, имеющаяся в сплошном блоке, достигает порога перколяции [30].

В трещиноватых породах, как правило, имеет место очень большой разброс локальной проницаемости в пределах системы трещин. Например, измерения, проведенные в гранит-урановом руднике Fanay-Augeres (Франция) более чем в 100 точках в пределах 100 м, показали, что разброс локальной проницаемости в разных точках составляет четыре порядка величины [31]. При этом, несмотря на то что вся сеть геометрически хорошо соединена, только 0,1% всех трещин пропускают большую часть потока между разными точками. Аналогичный результат описан в [24]. Поэтому даже хорошо связанная сеть при условии широкого распределения проницаемости отдельных трещин фактически оказывается вблизи порога перколяции [32].

В последнее время достигнут значительный прогресс в исследовании свойств поверхностей, ограничивающих реальные трещины. Они существенно отличаются от плоских параллельных поверхностей, которые в первом приближении используются при описании фильтрации жидкости в трещине. Профилометрические измерения, проведенные на стенках натуральных трещин, показали, что их рельеф носит крайне нерегулярный характер и обнаруживает самоаффинные (self-affine) фрактальные свойства [33—35], причем эти свойства наблюдаются независимо от типа пород и происхождения трещин [32]. То же, по-видимому, можно сказать и об апертуре натуральных трещин. Эти свойства сами по себе могут приводить к аномальным эффектам при переносе в потоке жидкости в отдельной трещине [23].

Все изложенное дает основания считать, что теория фильтрации через сети трещин должна включать описание этих сетей на основании известных свойств перколяционных систем.

Гидравлические тесты. Один из наиболее распространенных методов испытаний — гидравлические испытания (pumping tests, pressure transient test, borehole hydraulic tests, pressure response tests), при которых наблюдается изменение напора со временем на разных расстояниях при отборе или инъекции воды в скважину.

Для интерпретации результатов испытаний необходимо знать геометрические характеристики исследуемой среды. В частности, важнейшей характеристикой является зависимость сечения, через которое проходит исходящий из точечного источника поток, от расстояния до источника. Так, для трехмерной геометрии (неограниченная однородная пористая среда) $A \propto r^2$, где A — концентрация примеси, r — расстояние от источника, для двумерной геометрии (тонкий пласт, ограниченный параллельными плоскостями, или система параллельных трещин) $A \propto r^1$, для одномерной геометрии (канал или система каналов постоянного сечения) $A \propto r^0$.

Эксперименты в трещиноватых горных породах (fractured rocks) часто дают результаты, которые не могут быть интерпретированы на основе этих соотношений ни для какой размерности. Это радикально отличает трещиноватые среды от неконсолидированных пористых нетрещиноватых сред [36—38].

Все указанные соотношения справедливы по существу только для однородных (или упорядоченных неоднородных) сред. Для описания неоднородных неупорядоченных сред, например для фрактальной системы трещин, имеющей фрактальную размерность, отличную от 1, 2 или 3, эти соотношения не годятся.

Йортсос [37] предложил формализм расчета переходного режима, основанный на теории фракталов, а в [39] эта теория была проверена на численной модели фрактальной сети трещин. В [40] было проведено формальное обобщение геометрических соотношений уравнения переноса влаги на пространство произвольной размерности (не обязательно целой). При этом предполагается, что $A \propto r^\beta$, где $0 < \beta < 2$ — некоторое число, вообще говоря, нецелое. Показатель β связан с размерностью пространства n : $\beta = n - 1$. О величине n в [40; 38] говорится как о размерности потока (flow dimension). Такое обобщение можно ассоциировать с представлением о поровом объеме среды как о фрактальном объекте с дробной фрактальной размерностью.

В [41] эти идеи были применены к исследованию свойств водоносного слоя больших размеров. Исследования проводились на площадке Campus Test Site (Университет Свободного государства, Блумфонтейн, ЮАР) размерами приблизительно 200×200 м. Там имеется более 20 скважин глубиной 20—30 м. Характерная особенность этой площадки — наличие нескольких систем трещин, почти горизонтальных и наклонных, которые являются основными каналами фильтрации подземных вод.

Наиболее интересные для нас результаты были получены в гидравлических испытаниях, когда производилась откачка воды из одной из скважин и наблюдался временной ход падения напора (drawdown) на самой откачиваемой скважине и на удаленных скважинах на расстоянии 15—50 м. Ход изменения напора со временем зависит от геометрии задачи: в цилиндрическом случае ($n = 2$) падение происходит по логарифмическому закону со временем, в плоском ($n = 1$) — по корневому. Наблюдаемые в эксперименте [41] кривые не относились ни к одному из этих типов. Полученные данные были использованы для оценки величины размерности потока n . Оценки величины n , проведенные для двух разных участков площадки в экспериментах на двух скважинах, дали значения соответственно 1,75 и 1,85, т. е. меньше 2. Таким образом, это свидетельствует в пользу того, что данная система пор и каналов фильтрации воды имеет фрактальную структуру с дробной размерностью. В этом случае в принципе можно ожидать аномальной диффузии при переносе примесей.

В [42] сообщается о дополнительных экспериментах, проведенных на той же площадке, включая трассерные эксперименты со сходящимся потоком. Интерпретация результатов на основе модели течения с дробной размерностью с использованием значений индекса n , полученных в независимых предыдущих экспериментах, оказывается наиболее подходящей по сравнению с другими моделями.

Аналогичные методы и идеи в последнее время широко используются разными исследователями для характеристики свойств проницаемых сред на реальных площадках [43—47]. Так, в [44] описываются результаты гидравлических испытаний и тестов с трассерами, причем для интерпретации тестов использовались понятия размерности потока. Анализ результатов полевых гидравлических тестов, проведенных на Waste Isolation Pilot Plant Site (Карлсбад, США), привели к выводу о дробной размерности потока n , характеризующей исследуемую фильтрующую среду. Это можно считать указанием на фрактальную структуру сети проводящих трещин и каналов.

В [44] обращено внимание на то, что подобные гидравлические тесты не всегда дают определенное значение размерности потока n , характеризующее проницаемую среду, поскольку это значение меняется на разных

стадиях эксперимента. В [44] приведены примеры сред, которые на основании полевых испытаний могут быть характеризованы определенной размерностью потока n , и тех, для которых это невозможно. В последнем случае тесты разных типов, например гидравлические испытания (pumping tests) и тесты с трассером в сходящемся потоке (radial convergent tracer test), могут давать разные результаты. Это связано с тем, что тесты разных типов охватывают разные объемы среды вокруг испытательной скважины.

Следует подчеркнуть, что в обоих случаях речь идет о средах, которые заведомо не могут быть представлены как квазиоднородные (с обычной, целой размерностью) с усредненными свойствами.

В экспериментах, проведенных в Бретани (Франция) [48], помимо оценки размерности потока в гидравлических испытаниях ($n \approx 1,6$), исследована зависимость характерного времени отклика давления от расстояния до откачиваемой скважины. Эта зависимость оказалась степенной с неклассическим дробным показателем $\sim 2,8$.

В [46; 47] показано, что при переходных режимах отклика напора в гидравлических тестах могут проявляться свойства дробной размерности потока не только в том случае, если система каналов, проводящих воду в окрестности испытательной скважины, является фрактальной, т. е. автомодельной (selfsimilar) на всех масштабах. Отсутствие свойства фрактальности системы каналов на всех масштабах может приводить к смене типов переходных режимов. В любом случае обнаружение переходных режимов, характеризуемых дробной размерностью, служит указанием на существенно неоднородный характер сети трещин и каналов, и стохастическая адвекция в такой сети может проявлять аномальные свойства.

В [45] отмечается, что извлекаемая из данных опыта размерность потока может зависеть еще от степени нестационарности течения и граничных условий проведения эксперимента.

Таким образом, результаты гидравлических испытаний в трещиноватых непроницаемых (или плохо проницаемых) породах во многих случаях приводят к выводу, что сеть трещин в районе испытаний имеет фрактальную структуру, и течение в ней не может быть описано на основе приближения однородной среды с усредненными свойствами. Это проявляется в дробной размерности потока.

Трассерные тесты (Borehole Tracer Tests), в частности в трещиноватых породах, широко используются в последнее время для исследования переноса загрязнений в подземных водах с учетом их физико-химического взаимодействия с твердой матрицей [49—51]. Такие эксперименты дают также важную информацию о дисперсионных свойствах проницаемых сред.

Трассерные эксперименты проводятся в разных вариантах: с инъекцией примеси через одну из скважин и наблюдением концентрации на одной или нескольких удаленных скважинах, со сходящимся потоком, создаваемым при откачке воды из одной из скважин, в дипольной конфигурации, когда одновременно производятся откачка и инъекция.

Основная информация при таких экспериментах содержится во временном ходе концентрации трассера в откачиваемой скважине при залповом выбросе примеси через инъекционную скважину. Эти кривые содержат информацию о дисперсионных и сорбционных свойствах исследуемой среды.

Типичной особенностью трассерных экспериментов в трещиноватых породах (по сравнению с неконсолированными средами) является наличие пологого и продолжительного заднего фронта. Обычно считается, что задний фронт кривой обязан диффузии трассера в стенки проводящих каналов и процессам адсорбции-десорбции на стенках. На пути к откачиваемой скважине часть трассера задерживается на стенках за счет упомянутых механизмов, а затем, когда концентрация примеси в основном потоке становится мала, эта часть снова поступает в поток и принимается в откачиваемой скважине в течение длительного времени.

Однако есть ряд экспериментальных данных, показывающих, что происхождение хвоста может не иметь отношения к диффузии в стенки матрицы. К ним относится работа [49], где описываются результаты трассерных тестов, проведенных в Hubbard Brook Experimental Forest (в южной части Национального парка Белая Гора, округ Грэфтон, штат Нью-Гэмпшир, США). В этих экспериментах расстояние между инъекционной и приемной скважинами было 36 м.

Как показано в [49], все использованные трассеры, сильно различающиеся по скорости диффузии через гранитную матрицу, обнаруживают совершенно одинаковое поведение на больших временах и почти одинаковое — на малых. Это значит, что в условиях эксперимента [49] диффузия в матрицу не влияет на перенос примесей и форма хвоста обусловлена исключительно дисперсионными свойствами проницаемой среды, а не диффузионными и адсорбционными свойствами трассеров.

Форма хвоста в широком диапазоне изменения концентрации (около двух порядков величины) оказывается с хорошей точностью степенной, т. е. концентрация меняется со временем по степенному закону $C(t) \propto t^{-\gamma}$. Показатель γ , оцененный на основе опубликованных в [49] данных, оказался равным 1,7—1,8.

Эксперимент проводился в конфигурации «слабого диполя» (5% откачиваемой воды возвращалось в систему через инжектирующую скважину).

Это течение практически эквивалентно просто сходящемуся потоку, без инъекции воды. Если в таких условиях задний фронт временного профиля концентрации определяется целиком диффузией трассера в матрицу, то он должен быть степенным, но показатель γ в этом случае должен быть равным 1,5. Если же ход концентрации в приемной скважине определяется только «классической» дисперсией при фильтрации, приводящей к гауссовому пространственному профилю, то оба фронта (и передний, и задний) должны быть экспоненциальными.

Таким образом, обнаруженный в экспериментах [49] показательный задний фронт с отличным от 1,5 показателем может служить указанием на проявление в данном эксперименте аномальной природы дисперсии, связанной со стохастической адвекцией во фрактальной системе трещин.

Что касается переднего фронта профиля концентрации, то он оказывается экспоненциальным. При малых (по сравнению с максимумом) концентрациях его можно представить в виде $C(t) \propto \exp\left\{-\left(t/\tau\right)^\lambda\right\}$, где время t отсчитывается от максимума концентрации, а τ — некоторая константа. Важно, что оценка значения λ , по данным [49], дает $\lambda \neq 2$, как должно быть при классической диффузии трассера.

В эксперименте [50] представлен пример другого поведения трассеров в отношении взаимодействия с твердой матрицей, когда это взаимодействие значительно влияет на ход концентрации в приемном колодце. Эксперимент проведен в Aspö Hard Rock Laboratory (Оскарсхамн, Швеция). В нем использовался радиально сходящийся поток, создаваемый откачкой воды из приемной скважины. Расстояние между инжектирующей и приемной скважинами составляло около 5 м. Основным каналом перетока между скважинами, по-видимому, являлась большая трещина, простирающаяся далеко от места расположения скважин. В [23] показано, что аномальные режимы дисперсии трассеров могут возникать и при фильтрации через одиночную трещину, если ее апертура является сильно флуктуирующей величиной с дальнедействующими корреляциями.

Для различных трассеров наблюдаются разное время прихода примеси к приемнику, разные положения максимума концентрации и разные значения концентрации в максимуме. Измерение концентраций, как и в [49], проведено в широком динамическом диапазоне, перекрывающем 2—4 порядка величины.

Из представленных в [50] данных можно заключить, что для всех трассеров форма заднего фронта, как и в [49], является показательной. Что касается показателя γ , то он оказывается разным для разных трассеров.

Для тех трассеров, которые в значительной степени подвержены влиянию взаимодействия с матрицей, он близок к 1,5.

Среди использованных трассеров были имеющие низкую сорбционную способность и низкую диффузию в матрицу. Профили концентрации, относящиеся к этим трассерам, близко совпадают друг с другом, и можно предположить, что влияние взаимодействия с матрицей на них незначительно (что соответствует условиям эксперимента [50]). Для этих трассеров показатель степенного закона оказывается значительно больше — порядка 3,1. Таким образом, данные, опубликованные в [50], также можно интерпретировать как проявление аномальной дисперсии при адвекции в трещиноватой горной породе.

В работе [51] описан трассерный эксперимент, проведенный в хранилище жидких радиоактивных отходов на архипелаге Флорида-Кис. Производилась инъекция трассера в скважину, которая использовалась для сброса отходов, причем концентрация трассера измерялась одновременно на нескольких наблюдательных скважинах, расположенных на разных расстояниях (от 5 до 180 м) от инъекционной. Водоносный слой, в который инжестировался трассер, — известняк, пористая среда являлась бимодальной. Исследование образцов матрицы показало, что наряду с микромасштабными порами имеются трещины и каналы макроскопических размеров, которые, по-видимому, обеспечивают проницаемость среды.

В эксперименте использовался «консервативный» трассер SF_6 , который практически не взаимодействует с твердой матрицей. Как и во многих других трассерных экспериментах в трещиноватых породах, зависимость концентрации жидких радиоактивных отходов от расстояния имеет пологий задний фронт (tailing) на всех наблюдательных скважинах. К сожалению, представленные в [51] данные о концентрации перекрывают сравнительно узкий диапазон изменения, что не дает возможности определить форму хвоста профиля концентрации. Однако можно сделать некоторые оценки на основании данных о времени прихода максимума концентрации и величине концентрации в максимуме на разных расстояниях.

В однородном плоском слое (размерность $n = 2$) время t прихода максимума концентрации на расстоянии r от источника должно зависеть от r , как $t \propto r^2$. На основании экспериментальных данных, приведенных в [51], можно сказать, что если эта зависимость выполняется, то только на малых расстояниях от источника — до 5 м. На больших расстояниях t растет медленнее. В духе представления о дробной размерности потока при фильтрации в системе трещин фрактальной структуры можно предположить, что $t \propto r^\delta$. Показатель δ трудно оценить численно на основании экспериментальных данных [51] в силу значительного разброса значений t

для разных скважин, расположенных на близких расстояниях от источника, но можно определенно утверждать, что δ заметно меньше 2.

Для консервативного трассера (т. е. не поглощаемого матрицей) максимальная концентрация примеси C_m на расстоянии r в однородном плоском слое при классической дисперсии должна быть $C_m \propto 1/t^{1.5}$. На основании экспериментальных данных [51] показатель степенной зависимости между C_m и t существенно меньше классического значения 1,5.

Все это дает основания предполагать, что мы здесь имеем дело с проявлением аномальной дисперсии, связанной со стохастической адвекцией в трещиноватых горных породах.

Вообще неклассическое, нефиковское поведение передних и задних фронтов (early and late time tailing) профилей концентрации примеси (breakthrough curves) является типичным для трещиноватых сред. Негауссовы хвосты концентрационных профилей наблюдались в экспериментах [52—54]. Для формального описания таких результатов в [55; 56] выдвинута гипотеза о масштабозависимой дисперсии. Предполагается, что движение облака примеси (plume) описывается перемещением центра тяжести и диффузионным расширением. При этом коэффициент дисперсии по аналогии с турбулентной диффузией является функцией размеров облака примеси. Рассеяние примеси и увеличение размеров облака происходят благодаря флуктуациям скорости фильтрации масштаба порядка или меньше размеров облака. Поэтому для осуществления супердиффузионного режима необходимо, чтобы имелись дальнедействующие корреляции поля скоростей.

Следует отметить, что интерпретация трассерных тестов в трещиноватых средах в настоящее время возможна только на качественном уровне в силу сложности характеристики геометрии течения в сети трещин в каждом конкретном случае. Кроме того, дисперсия трассера должна оцениваться на фоне неоднородного поля скорости на основе нестационарной теории стохастической адвекции, которой пока не существует.

Трассерные тесты в естественных условиях без искусственных воздействий (natural gradient tracer tests). В экспериментах этого типа исследуется распространение трассера, инжектированного за короткое время в водоносный слой. Течение в слое после инъекции примеси происходит под действием естественного градиента и не подвергается искусственным воздействиям (откачке, инъекции). Концентрация трассера измеряется с помощью сети наблюдательных скважин. Эксперименты такого рода в принципе дают возможность прямого наблюдения изменений размеров облака примеси со временем, а также пространственного профиля концентрации.

Имеются подробные описания двух серий данных трассерных тестов, проведенных с достаточно хорошим пространственным и временным разрешением, что позволяет детально проследить профиль облака и его эволюцию. Один из них проведен на площадке Cape Cod (штат Массачусетс, США) [57]. Другой — macrodispersion experiment (MADE) — был проведен на базе Columbus Air Force (штат Миссисипи, США) [58; 59].

Водоносный слой в эксперименте MADE образован песчано-гравийной смесью с включениями глины и наносных пород, он крайне неоднороден, обладает большим разбросом локальных значений проницаемости. Этим данный эксперимент отличается от других аналогичных. В водоносный слой инжестировалось около 10 м^3 воды, содержащей одновременно разные трассеры, включая «консервативные», такие как бромид, тритий (тритированная вода). Наблюдения продолжались от 15 до 20 месяцев.

Были получены следующие результаты. Расширение облака происходит в горизонтальном направлении, т. е. двумерным образом, вертикальное расширение мало. Размеры облака увеличиваются со временем быстрее, чем по диффузионному закону $\langle r^2 \rangle \propto t^{2/\alpha}$. При этом продольный (вдоль направления среднего течения) и поперечный размеры характеризуются разными значениями показателя α : $\alpha \approx 1,2$ для продольного размера, $\alpha \approx 1,5$ для поперечного ($\alpha = 2$ соответствует обычному диффузионному закону). С этим согласуются данные об изменении со временем максимальной и средней концентрации в плюме.

Кроме того, обнаружено, что профиль концентрации трития (эксперимент MADE-2) существенно несимметричен в направлении среднего распространения: он имеет сильно вытянутый в сторону течения хвост, который является не экспоненциальным, а степенным.

Качественно похожие в отношении «супердиффузионного» характера расширения облака результаты были получены и на площадке Cape Cod. Водоносный слой в этом случае также был песчано-гравийного состава, однако степень его неоднородности, по-видимому, была несколько ниже, чем на площадке MADE. Как и в MADE, вертикальная дисперсия плюма оказалась мала, так что диффузия была по существу двумерной.

Было установлено, что расширение облака в продольном к среднему потоку и поперечном направлениях происходит по-разному. Продольное расширение имеет супердиффузионный характер с показателем $\alpha \approx 1,65$. Поперечное рассеивание плюма описывается обычным диффузионным законом ($\alpha \approx 2$). Подробный анализ данных этих экспериментов можно найти в [68; 69].

Таким образом, в двух разных экспериментах непосредственным наблюдением установлено, что дисперсия примесей при естественной фильтрации в сильнонеоднородных водоносных слоях происходит аномальным образом и не может быть описана на основании классического диффузионного подхода.

Зона неполного насыщения (Vadose zone). Основной вопрос при оценке проводящих свойств ненасыщенных трещиноватых пород касается механизма распространения влаги в таких средах. Согласно классической капиллярной модели [60; 61] вода за счет капиллярного эффекта впитывается в твердую матрицу и распространяется за счет фильтрации по ней. При этом трещины являются препятствиями для движения воды на большие расстояния. Для сред, наиболее интересных с точки зрения задачи захоронения отходов (например, трещиноватый туф Yucca Mountain), по-видимому, более реалистична другая модель, согласно которой основным каналом распространения воды являются именно трещины, а капиллярное впитывание представляет сравнительно слабый эффект [62; 63]. В этом случае фильтрационный поток оказывается крайне неоднородным и нестационарным, наблюдается наличие предпочтительных путей распространения [64]. Режим распространения воды и переноса примесей определяется статистическими свойствами сети трещин.

К настоящему времени проведено немного экспериментальных исследований фильтрации воды и транспорта примесей в трещиноватых ненасыщенных породах. В [65; 66] описана серия полевых экспериментов с измерениями структуры фильтрационного потока и транспорта примесей через трещиноватую породу, а также внутренней структуры трещин. Наблюдения [65; 66] показали пространственную и временную нестабильность потока, сильное каналирование, когда большая часть потока (70—100%) проходит через малую часть доступного сечения трещин (15—20%). При этом «активные» пути движения воды постоянно меняются в зависимости от циклов смачивания/осушения, химического взаимодействия потока со стенками, отложений на стенках растворенных в воде материалов. Все это значительно усложняет картину фильтрации в ненасыщенной зоне по сравнению с насыщенной.

В [67] описаны результаты пневматических испытаний, проведенных в туннеле в Yucca Mountain, который является предположительным местом захоронения отходов. В блоке с размерами 15×20×15 м было просверлено в разных направлениях около 30 скважин длиной 5—10 м. В каждой скважине имелся уплотненный участок, через который подавался воздух с постоянным расходом. Одновременно с подачей воздуха измерялось давление в самой нагнетаемой скважине и во всех остальных. Процедура

нагнетания и измерения давления повторялась последовательно на всех скважинах. Отклик давления быстро, в течение нескольких минут, устанавливался на стационарном значении. Эти данные позволили оценить проницаемость вблизи каждой скважины (усредненную по длине уплотненной области), а также с помощью моделирования тестов (программа TOUGH2) путем подбора проницаемости во всей расчетной области. В результате получена трехмерная карта проницаемости на сетке $34 \times 26 \times 24$ узлов.

Эти данные не могут, конечно, характеризовать структуру сети трещин на исследуемом участке. В то же время они дают информацию о разбросе локальных значений проницаемости. Этот разброс очень велик — пять порядков величины. Быстрый отклик давления, наблюдаемый во всех скважинах, свидетельствует о том, что все они хорошо соединены друг с другом сетью трещин (по крайней мере, пневматически).

Результаты экспериментов. Математические модели. Таким образом, приведенные результаты лабораторных и полевых экспериментов показывают, что для сильнонеоднородных неупорядоченных сред, какими являются трещиноватые горные породы, неклассический, нефиковский характер переноса представляется скорее правилом, чем исключением. При этом рост облака частиц примеси со временем $R(t)$ может идти быстрее, чем $R \sim \sqrt{t}$, а убывание концентрации при $r \sim R(t)$ — медленнее, чем по гауссову закону. Если хвосты убывают по степенному закону, то их называют тяжелыми (heavy tails). Причиной наличия аномальных режимов переноса и тяжелых хвостов в данном случае является сложная неоднородная структура натуральных сетей трещин, которые, как показывают непосредственные наблюдения, проявляют фрактальные свойства и подпадают под определение перколяционных сред. Отсюда следует, что предельно допустимые концентрации радионуклидов могут распространяться на расстояния, которые на много порядков превышают найденные из классических представлений. Все это означает, что для получения адекватных оценок надежности радиоактивных захоронений требуется разработка новых подходов.

Простейшими математическими моделями переноса в сильнонеоднородных средах, характеризующихся отсутствием пространственного масштаба, являются модели случайного блуждания частиц, в которых среда представляется однородной, а ее стохастические свойства проявляются в выборе функции распределения приращений координат блуждающей частицы. Если приращения координат происходят через одинаковые промежутки времени и функция приращений имеет конечную дисперсию, изменение со временем плотности пространственного распределения частиц описывается классическим уравнением диффузии.

Если дисперсия приращений координат становится бесконечной, то в одномерном случае функция распределения смещений может быть только степенной и определяться двумя параметрами: α , задающим степенное убывание хвостов, и β , задающим степень асимметрии распределения.

При $\alpha = 2$ распределение стремится к нормальному, при $\alpha = 1$ переходит в распределение Коши. При $\alpha < 1$ функция распределения приращений координат блуждающей частицы характеризуется не только бесконечной дисперсией, но и бесконечно большой средней величиной. И хотя в этом случае мы не можем получить устойчивых средних для каждой из частиц в отдельности, средние значения плотности частиц в заданной точке пространства остаются устойчивыми переменными и имеют привычный физический смысл.

В статистической модели случайного блуждания нейтральных частиц в сильнонеоднородных средах вместо гауссова распределения длины пробега следует брать α -устойчивое распределение [70—74], характеризующееся бесконечно большой дисперсией и наличием тяжелых хвостов. В этом случае частицы время от времени будут совершать так называемые «полеты Леви» (Lévy flights) — перемещаться на значительные расстояния, что можно физически интерпретировать как попадание частицы в очень длинную трещину, внутри которой перемещение считается мгновенным. Можно показать, что средняя плотность частиц при движении в режиме полетов Леви описывается так называемым уравнением дробной диффузии с оператором дробного пространственного дифференцирования.

Если перемещения частиц осуществляются не через каждый фиксированный промежуток времени, а иногда происходят задержки в перемещениях, то можно ввести среднее время ожидания частицей акта перемещения. Если это среднее время конечно, то уравнение дробной диффузии будет содержать производную по времени первого порядка. При бесконечном среднем времени ожидания производная по времени в уравнении дробной диффузии также становится дробной с показателем меньше единицы.

Описанный подход к моделированию переноса консервативной примеси в сильнонеоднородных средах по своей сути является феноменологическим. Основной при таком подходе — вопрос об определении показателей дробных производных или параметров функции распределения приращений координат частиц в их случайном блуждании по результатам лабораторных измерений или натурных наблюдений. Такую задачу естественно назвать обратной. Для отработки методик решения обратной задачи необходимо использовать расчеты прямой задачи о временной эволюции заданного начального распределения переносимой субстанции. Для этого

целесообразно применять алгоритмы численного решения интегро-дифференциальных уравнений дробной диффузии либо алгоритмы прямого стохастического моделирования.

Другим возможным подходом к моделированию распространения примеси в зоне полного влагонасыщения является применение модели стохастической адвекции. Предложенная модель трактует перенос радионуклидов как адвекцию на случайном поле скоростей с дальнедействующими корреляциями скорости.

Модель стохастической адвекции представляет собой яркий пример того, как во фрактальной сильно неупорядоченной среде может реализоваться режим дробной диффузии (супердиффузии) на умеренных расстояниях с одновременным отсутствием тяжелых степенных хвостов в распределении концентрации на больших расстояниях.

История возникновения задач с аномальной диффузией ведет начало с наблюдений турбулентной диффузии Ричардсоном в 1926 г. [75]. Стационарная теория аномального переноса в конце 1960-х годов была стимулирована Монтроллом, Шером и Вейссом в их описании переноса в аморфных полупроводниках (см., например, [76]). Моделью CTRW (Continuous Time Random Walks), предложенной ими, оказалось удобно описывать множество физических явлений [77—83]. Говоря коротко, эта модель связывает распределение концентрации (при известных начальных данных) с пространственно-временным распределением вероятностей прыжка отдельной частицы.

Кроме CTRW были разработаны различные модели дробной диффузии [84—89] с уравнениями в дробных производных, которые можно получить в том числе из модели CTRW (см. обзор [90] и работы [91—96]). Есть и другие модели [97—120]. Уравнения в дробных производных имеют то преимущество по сравнению с CTRW, что допускают как наличие внешних полей, так и граничных условий не на бесконечности. В бесконечной среде и без внешних полей уравнения, содержащие дробную производную порядка μ по пространственным координатам, имеют решение со степен-

ной асимптотикой $\frac{t}{|x|^{1+\mu}}$, $\mu < 2$, типичной для распределений Леви

(см., например, [89—92; 121—126]), которым подчиняется распределение вероятностей скачка при полетах Леви — скачках с бесконечной дисперсией.

Хотя уравнения в дробных производных весьма удобны, все же они вводятся либо феноменологически, либо на основе модели CTRW, чисто математической по своей природе. Другой способ анализа процессов аномальной диффузии — рассмотреть непрерывное далеко скоррелированное

стационарное поле скорости, в котором находится частица. История решения такого рода задач восходит ко времени Тейлора и Колмогорова [127; 128]. Хотя задача и кажется простой, долгое время никто не рассматривал ее вне теории турбулентности ([129]; см. обзоры [130—132] и ссылки в них; в литературе об аномальной турбулентной диффузии доминирует противоположное стационарному приближение Крэйчнана). Вне теории турбулентности в рамках физических моделей задача начала рассматриваться лишь около трех десятилетий назад ([133]; см. также [134—141]).

В работе Дрейзина и Дыхне [133], в частности, исследовано движение частицы в слоистом случайном поле скоростей, имеющем конечный радиус корреляции в поперечном направлении, и сделано заключение о супердиффузии в плоскости слоев. Заметим, что в западной литературе (см., например, обзоры [132; 142]) первое рассмотрение этого примера ошибочно приписывается Масерону и де Марсили [143]. Работа Дыхне и Напартовича [134], хотя имеет дело с переносом излучения в плазме, предлагает первую после феноменологического предложения Монино [84] (а прежде Хинчина и Леви [85]) физическую постановку задачи, приводящую к уравнениям в дробных производных. В рамках упрощающих предположений в работах Коха и Брэди [144; 145] показано, что в поле скорости с корреляциями, убывающими в пространстве степенным образом, при определенных показателях убывания имеет место супердиффузия; поведение хвостов не рассмотрено.

В последние десятилетия интерес к процессам аномальной диффузии остается неизменно высоким в связи с неклассическими задачами, возникающими в физике полупроводников, физике плазмы, астро- и биофизике, медицине, гидрогеологии, экономике и др. [27; 83; 89; 121—122; 133—134; 142; 146—160]. Если говорить именно о супердиффузии (которая на текущий момент изучена хуже субдиффузии), то она встречается в таких примерах, как турбулентная диффузия [75; 129; 161—162], перенос примеси в слоистых полях скоростей [133], в неоднородных скальных породах [163—165], в турбулентной плазме [166]; ею описывается даже движение бактерий [167] и полет альбатроса [168].

Несмотря на столь широкую распространенность и сравнительно давнюю историю исследований аномальной диффузии, остается еще множество нерешенных вопросов. Поскольку это явление возникает, в частности, при переносе в геологических средах такой примеси, как радионуклиды, в связи с проблемой надежности радиоактивных захоронений особенно актуальным представляется вопрос о форме хвостов функции распределения частиц, диффундирующих аномально (хвостами называется асимптотическое распределение концентрации на расстояниях $r \gg R(t)$). Об открытости этого

вопроса говорится, в частности, в [142, с. 268]. Между тем он имеет огромное практическое значение: ведь разница, например, степенного и гауссова хвостов в удаленной от источника области, важной для жизнедеятельности людей, может достигать многих порядков величины.

Возможно также протекание процессов аномальной диффузии в средах, не являющихся случайными или фрактальными [150—151]. В указанных работах принята «гребешковая» модель среды. Как будет показано, можно предложить гораздо более простую среду, где дисперсия растет аномально (как и в [150], на промежуточных временах, в переходном режиме, который в реальных задачах может оказаться чрезвычайно продолжительным). Возможность субдиффузии в такой простой задаче, модельной для геологических сред, также очень важна для приложений.

Имеются, таким образом, различные физические задачи, приводящие к аномальной диффузии, и математические постановки, приводящие к степенным хвостам распределения частиц. Чрезвычайно назрела, как видно, необходимость строгой (без упрощающих предположений) и сугубо физической формулировки и решения задачи об аномальной диффузии (включая нерешенный вопрос о хвостах).

Структура и содержание монографии. Глава 1 посвящена различным физическим моделям распространения радионуклидов в сильнонеоднородных средах. Рассмотрена задача о стохастической адвекции в далеко скоррелированных полях скоростей с нулевым средним. Постановка задачи учитывает также молекулярную диффузию и возможное отличие от нуля средней скорости. Приведены теоретический анализ и сравнение с результатами прямого численного моделирования. Исследована зависимость от показателя в степенном убывании коррелятора скорости h . При $h < 1$ имеет место супердиффузия, при $h > 1$ — классическая диффузия. Получены асимптотические выражения для хвостов концентрации.

Случай $h = 1$ требует особого рассмотрения. Выводятся соответствующие этому случаю зависимости распределения концентрации от времени. Исследуется задача с ненулевой средней скоростью адвекции, найдены режимы переноса и асимптотические выражения для хвостов. Для всех случаев флуктуации коэффициента диффузии оказываются irrelevantными по отношению к смене режимов.

Рассмотрена задача Дыхне о классическом переносе как в одиночной трещине (плоскопараллельной или цилиндрической), окруженной слабопроницаемой матрицей, так и в различных системах трещин. Проанализирована временная зависимость среднеквадратичной дисперсии частиц в трещинах.

В главе 2 представлены математические модели и результаты численного моделирования аномальной диффузии. Исследован стохастический подход к моделированию аномальной диффузии, при котором диффузия описывается процессом случайного блуждания частиц. Для этого был разработан алгоритм генерации случайных величин со степенными хвостами. Генерация строго устойчивых случайных величин с тяжелыми хвостами затруднена из-за отсутствия аналитических выражений для плотности вероятности самой функции распределения. В данной работе представлен генератор так называемого аппроксимационного типа для моделирования случайных последовательностей со строго устойчивыми распределениями. Продемонстрированы результаты работы алгоритма.

Другой подход к моделированию аномальной диффузии — решение нестационарных уравнений с производными дробного порядка. Приведено несколько определений дробной производной, показаны некоторые способы вывода уравнения дробной диффузии. Для одномерного случая представлены вычислительные алгоритмы, позволяющие получить решения уравнений диффузии с дробной производной по пространству при различных наборах параметров.

Другая модель, подробно рассмотренная в главе 2, — модель протекания влаги по перколяционному кластеру. Приведены новые эффективные вычислительные алгоритмы, позволяющие решать уравнения просачивания на различных перколяционных решетках в двумерном случае. Представлены некоторые результаты расчетов.

В главе 3 рассмотрен один из немаловажных и сложных аспектов получения завершенной методики прогнозирования распространения радионуклидов — решение обратной задачи по идентификации основных параметров модели дробной диффузии. Предложено несколько различных подходов к решению обратной задачи. Основным из них признан подход, связанный с применением искусственных нейронных сетей (ИНС). Представлены основные принципы работы ИНС и их классификация. С помощью ИНС решена обратная задача дробной диффузии как в одномерном, так и в двумерном случаях.

Благодарности. Авторы выражают искреннюю признательность доктору физико-математических наук В. Н. Семенову, взявшему на себя труд редактировать и дополнять данную монографию. Отдельные благодарности доктору физико-математических наук О. С. Сорокиной за помощь при написании главы 2, а также кандидату физико-математических наук Е. А. Савельевой-Трофимовой, Ю. И. Юркову и И. О. Уразову за неоценимый вклад в написание главы 3.

Литература

1. *Коровин Ю. А., Мурогов В. М.* Экологически приемлемый и безопасный топливный цикл ядерной энергетики. — Обнинск, 1991.
2. *Коровин Ю. А., Мурогов В. М.* Современные проблемы ядерной энергетики / ОБГТУ АЭ. — Обнинск, 2006.
3. *Киселев Г. В.* Проблемы развития ядерной энергетики. — М., 1990.
4. *Бахметьев А. М., Гуреева Л. В., Кузавков Н. Г.* и др. Ядерная энергетика будущего: атомная энергетика России на пороге XXI века. — М., 1995.
5. *Красноселов В. А.* Введение в атомную энергетику. — Ульяновск, 2004.
6. *Кацай А. В.* Атомная энергетика в вопросах и ответах. — М., 2003.
7. National Research Council. Rock fractures and fluid flow: contemporary understanding and applications. — Washington, DC: National Academy Press, 1996.
8. *Küntz M., Lavalee P.* Experimental Evidence and Theoretical Analysis of Anomalous Diffusion during Water Infiltration in Porous Building Materials // J. Phys. D: Applied Phys. — 2001. — Vol. 34. — P. 2547—2554.
9. *Küntz M., Lavalee P.* Anomalous Spreading of a Density Front from an Infinite Continuous Source in a Concentration-Dependent Lattice Gas Automaton Diffusion Model // J. Phys. D: Applied Phys. — 2003. — Vol. 36. — P. 1135—1142.
10. *Küntz M., Lavalee P.* Anomalous diffusion is a rule in concentrated-dependent diffusion process // J. Phys. D: Applied Phys. — 2004. — Vol. 37. — P. L5—L8.
11. *Scheven U. M., Sen P. N.* Spatial and temporal coarse graining for dispersion in randomly packed spheres // Phys. Rev. Lett. — 2002. — Vol. 89, № 25.
12. *Sternberg S. P. K.* Dispersion Measurements in Highly Heterogeneous Laboratory Scale Porous Media // Transport in Porous Media. — 2004. — Vol. 54. — P. 107—124.
13. *Raven K. G., Gale J. E.* Water flow in natural rock fracture as a function of stress in and sample size // Int. J. Rock. Mech. Min. Sci. Geomech. Abstr. — 1985. — Vol. 22 (4). — P. 251—261.
14. *Pyrac-Notle L. J., Meyer L. R., Cook N. G.* et al. Hydraulic and mechanic properties of natural fractures in low permeable rock // Proc. 6th Int. Cong. Mech. 1987. — [S. l.], 1987. — P. 225—231.
15. *Durham W. B., Bonner B. P.* Self-propping and fluid flow in slightly off-set joint at high effective pressures // J. Geophys. Res. — 1994. — Vol. 99 (B5). — P. 9391—9399.
16. *Keller A. A., Roberts P. V., Kitanidis P. K.* Prediction of single-phase transport parameters in a variable aperture fracture // Geophys. Res. Lett. — 1995. — Vol. 22 (11). — P. 1425—1428.

17. *Vandergraaf T. T.* Radionuclide migration experiments under laboratory conditions // *Geophys. Res. Lett.* — 1995. — Vol. 22 (11). — P. 1409—1412.
18. *Nolte D. D., Cook N. G. W., Pyrac-Notle L. J.* The fractal geometry of flow paths in natural fractures in rock and the approach to percolation // *Pure Appl. Geophys.* — 1985. — Vol. 131. — P. 111—138.
19. *Nicholl M. J., Glass R. J., Nguen H. A.* Small-scale behavior of single gravity-driven fingers in an initially dry fracture // *Proc. High Level Radioactive Waste Manag. Conf. Las Vegas, NV, 1993.* — [S. 1.], 1993.
20. *Rasmussen T. C.* Steady fluid flow and travel times in partially saturated fractures using a discrete air-water interface // *Water Resources Res.* — 1991. — Vol. 27. — P. 67—76.
21. *Rasmuson A., Neretnieks I.* Radionuclide transport in fast channels in crystalline rock // *Water Resources Res.* — 1986. — Vol. 22. — P. 1247—1256.
22. *Su G. W., Geller J. T., Prues K., Wen F.* Experimental studies of water seepage and intermittent flow in unsaturated, rough-walled fractures // *Water Resources Res.* — 1999. — Vol. 35, № 4. — P. 1019—1037.
23. *Roux S., Plouraboue F., Hulin J. P.* Tracer Dispersion in Rough Open Cracks // *Transport in Porous Media.* — 1998. — Vol. 32. — P. 87—116.
24. *Karasaki K., Friefeld B., Cohen A. et al.* Multidisciplinary fractured rock characterization study at Raymond field site, Raymond, SA // *J. of Hydrology.* — 2000. — Vol. 236. — P. 17—34.
25. *Odling N. E.* Scaling and connectivity of joint systems in sandstone from western Norway // *J. Struct. Geol.* — 1997. — Vol. 19. — P. 563—571.
26. *Bonnet E., Bour O., Odling N. E. et al.* Scaling of fracture systems in geological media // *Rev. of Geophys.* — 2001. — Vol. 39 (3). — P. 347—383.
27. *Isichenko M. B.* Percolation, statistical topography and transport in random media // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — Vol. 64, № 4. — P. 961—1043.
28. *Stauffer D., Aharony A.* Introduction to percolation Theory. — London: Taylor & Francis, 1992.
29. *Bercowitz B.* Analysis of fracture network connectivity using percolation theory // *Math. Geol.* — 1995. — Vol. 27. — P. 467—484.
30. *Gueguen Y., David C., Gavrilenko P.* Percolation and fluid transport in the crust // *Geophys. Res. Lett.* — 1999. — Vol. 26. — P. 2001—2004.
31. *Ando K., Kostner A., Neuman S.* Stochastic continuum modeling of flow and transport in crystalline rock mass: Fanay-Augeres, France, revisited // *Hydrogeology J.* — 2003. — Vol. 11. — P. 525—531.
32. *Berkowitz B.* Characterizing flow and transport in fractured geological media: A review // *Advances in Water Resources.* — 2002. — Vol. 25. — P. 861—884.

33. *Brown S. R., Scholz C. H.* Broad bandwidth study of the topology of natural rock surfaces // *J. Geophys. Res.* — 1985. — Vol. 90 (B24). — P. 1275—1282.
34. *Poon C. Y., Sayles R. S., Jones T. A.* Surface measurements and fractal characterization of naturally fractured rocks // *J. Phys. D.* — 1992. — Vol. 25 (8). — P. 1269—1275.
35. *Schmittbuhl J., Schmitt F., Sholz C. H.* Scaling invariance of crack surfaces // *J. Geophys. Res.* — 1995. — Vol. 100 (B4). — P. 5953—5973.
36. *Novakowski K. S., Bikerton G. S.* Borehole measurement of the hydraulic properties of low-permeability rock // *Water Resources Res.* — 1997. — Vol. 33 (11). — P. 2509—2517.
37. *Chang J., Yortsos Y. S.* Pressure Transient Analyses of Fractal Reservoirs: Paper SPE 18170. Presented on 63rd Annual SPE Technical Conference and Exhibition, Soc. of Pet. Eng., Houston, Tex., October 2—5, 1988. — [S. 1.], 1988.
38. *Riemann K., Van Tonder G.* Interpretation of single-well tracer tests using fractional-flow dimensions. — Pt. 1: Theory and mathematical models // *Hydrogeology J.* — 2002. — Vol. 10. — P. 351—356.
39. *Acuna J. A., Yortsos Y. S.* Applications of Fractal Geometry to the Study of Network of Fractures and their Pressure Transient // *Water Resources Res.* — 1995. — Vol. 31 (3). — P. 527—540.
40. *Barker J. A.* A generalized radial flow model for hydraulic tests in fractured rock // *Water Resources Res.* — 1988. — Vol. 24, № 10. — P. 1796—1804.
41. *Riemann K., Van Tonder G.* Interpretation of single-well tracer tests using fractional-flow dimensions. — Pt. 2: A case study // *Hydrogeology J.* — 2002 — Vol. 10. P. 357—367.
42. *Riemann K., Van Tonder G.* Different Approaches to analyzing single-well and multiple-well tracer tests in fracture rock aquifers // *Proceedings of the International Groundwater Symposium, 2002.* — [S. 1.], 2002. — P. 246—250. — (IAHR, Paseo Bajo Virgen del Puerto 3, 28005, Madrid, Spain).
43. *Filho J. M.* A fractal dimension model for hydraulic parameter evaluation from single well tests in fractured media // *Proceedings of Int. Conf. On Groundwater in Fractured Rocks (2003), Prague.* — [S. 1.], 2003. — P. 251—252.
44. *Beauheim R. L., Roberts R. M., Avis J. D.* Well testing in fractured media: Flow dimensions and REV's // *Proceedings of the International Groundwater Symposium, 2002.* — [S. 1.], 2002. — P. 277—280. — (IAHR, Paseo Bajo Virgen del Puerto 3, 28005, Madrid, Spain).
45. *Walker D. D., Roberts R. M.* Summary of flow Dimensions Corresponding to Hydrologic Conditions // *Proceedings of the International Ground-*

- water Symposium, 2002. — [S. 1.], 2002. — P. 295. — (IAHR, Paseo Bajo Virgen del Puerto 3, 28005, Madrid, Spain).
46. *Jourde H., Piste S., Perrochet P., Drogue C.* Origin of Fractional Flow Dimension to a Partially Penetrating Well in Stratified Fractured Reservoir. New Results Based on Synthetic Fracture Network // *Advances in Water Resources*. — 2002. — Vol. 25. — P. 371—387.
47. *Doe T. W.* Fractional dimension analyses of constant pressure well tests // *Proceedings, Annual SPE Technical Conference and Exhibition, Formation Evaluation and Reservoir Geology, Soc. of Pet. Eng, Dallas, Tex, October 6—9, 1991*. — [S. 1.], 1991. — P. 461—467.
48. *Le Borgne T., Bour O., De Dreuzy J.-R., Davy P.* Flow model relevant to fractured crystalline aquifers: insights from a scaling interpretation of pumping tests // *Proceedings of the International Conference «Groundwater In Fractured Rocks»*, September 15—19, 2003, Prague, Czech Republic / Eds. J. Krásný, Z. Hrkal, J. Bruthans. — [S. 1.], 2003.
49. *Becker M. W., Shapiro A. M.* Tracer transport in fractured crystalline rock: Evidence of non-diffusion breakthrough tailing // *Water Resources Res.* — 2000. — Vol. 36, № 7. — P. 1677—1686.
50. *Widestrand H., Anderson P., Byegard J. et al.* In-situ Migration Experiments at Aspö Hard Rock Laboratory, Sweden: Results of Radioactive Tracer Migration Studies in a Single Fracture // *J. of Radioanalytical and Nuclear Chemistry*. — 2001. — Vol. 250, № 3. — P. 501—517.
51. *Dillon K., Bumett W., Kim G. et al.* Groundwater Flow and Phosphate Dynamics Surrounding a High Discharge Waste Water Disposal Well in the Florida Keys // *J. of Hydrology*. — 2003. — Vol. 284. — P. 193—210.
52. *Silde R. C., Nilsson B., Fredericia J.* Spatially varying hydraulic and solute transport characteristics of fractured till determined by field tracer tests, Funen, Denmark // *Water Resources Res.* — 1998. — Vol. 34. — P. 2515—2527.
53. *McKay L. D., Sanford W. E., Strong J. M.* Field-scale migration of colloidal tracers in a fractured shale saprolite // *Ground Water*. — 2000. — Vol. 38 (1). — P. 139—147.
54. *Kosakowski G., Bercowitz B., Scher H.* Analysis of field observation of tracer transport in fractured till // *J. Contam. Hydrol.* — 2001. — Vol. 47 (1). — P. 29—51.
55. *Gelhar L. W., Wetly C., Rehfeldt K. R.* A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers // *Water Resources Res.* — 1992. — Vol. 28 (7). — P. 1955—1974.
56. *Rajaram H., Gelhar L. W.* Plume-scale dependent dispersion in aquifers with a wide range of scales of heterogeneity // *Water Resources Res.* — 1995. — Vol. 31, № 10. — P. 2469—2482.

57. *Le Blanc D. H., Garabedian S. P., Hess K. M. et al.* Large scale natural gradient test in sand and gravel, Cape Cod, Massachusetts. — 1: Experimental design and observed tracer movement // *Water Resources Res.* — 1999. — Vol. 27 (5). — P. 895—910.
58. *Adams E. E., Gellar L. W.* Field study of dispersion in heterogeneous aquifer. — 2 : Spatial moments analysis // *Water Resources Res.* — 1992. — Vol. 28 (12). — P. 3293—3307.
59. *Boggs J. M., Beard L. M., Long S. E., McGee M. P.* Database of the second macrodispersion experiment (MADE-2) / *Electric Power Res. Inst.* — Palo Alto, Ca., 1993. — (EPRI report TR-102072).
60. *Wang J. S. Y., Narasimhan T. N.* Hydrologic mechanisms governing fluid flow in a partially saturated, fractured porous medium // *Water Resources Res.* — 1985. — Vol. 21. — P. 1861—1874.
61. *Peters R. R., Klavetter E. A.* A continuum model for water movement in unsaturated fracture rock // *Water Resources Res.* — 1988. — Vol. 26. — P. 415—424.
62. *Pruess K., Faybichenko B., Bodvarsson G.* Alternative concepts and approaches for modeling flow and transport in thick unsaturated zones of fractured rocks // *J. Contam. Hydrol.* — 1999. — Vol. 38. — P. 281—322.
63. *Pruess K.* A mechanistic model for water seepage through thick unsaturated zones of fractured rocks // *Water Resources Res.* — 1999. — Vol. 35 (4). — P. 1039—1051.
64. *Foster S. S. D., Carington S. A.* The infiltration of tritium in the chalk unsaturated zone // *J. Hydrol.* — 1980. — Vol. 46. — P. 343—364.
65. *Dahan O., Nativ R., Adar E. M., Berkowitz B., Ronen Z.* Field observation of flow in a fracture intersecting unsaturated chalk // *Water Resources Res.* — 1999. — Vol. 35 (11). — P. 3315—3326.
66. *Dahan O., Nativ R., Adar E. M., Berkowitz B., Weisbrod N.* On fracture structure and preferential flow in unsaturated chalk // *Ground Water.* — 2000. — Vol. 3893. — P. 444—451.
67. *Huang K., Tsang Y.W., Bodvarsson G. S.* Simultaneous inversion of air-injection tests in fractured unsaturated tuff at Yucca Mountain // *Water Resources Res.* — 1999. — Vol. 35 (8). — P. 2375—2386.
68. *Meerschaert M., Benson D. A., Baumer B.* Operator Lévy motion and multiscaling anomalous diffusion // *Phys. Rev.* — 2001. — Vol. 63. — P. 021112.
69. *Benson D. A., Shumer R., Meerschaert M., Wheatcraft S. V.* Fractional dispersion, Lévy motion, and the MADE tracer tests // *Transport in porous media.* — 2001. — Vol. 42. — P. 211—240.
70. *Saichev A. I., Zaslavsky G. M.* Fractional kinetic equations: Solutions and applications // *J. Chaos.* — 1997. — Vol. 7. — P. 753—764.
71. *Montroll E. W., Weiss G. H.* Random walks on lattices // *J. Mathematical Phys.* — 1965. — Vol. 6. — P. 167—181.

72. *Shlesinger M., Klafter J., Wong Y. M.* Random walks with infinite spatial and temporal moments // *J. Statist. Phys.* — 1982. — Vol. 27. — P. 499—512.
73. *Schumer R., Benson D., Meerschaert M., Wheatcraft S.* Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation // *J. Contaminant Hydrology.* — 2001. — Vol. 48. — P. 69—88.
74. *Benson D.* The Fractional Advection-Dispersion Equation: Development and Application: A dissertation submitted in partial fulfillment of the Doctor of Philosophy in Hydrogeology. — Nevada, USA, 1998.
75. *Richardson L. F.* Atmospheric diffusion shown on a distance-neighbour graph // *Proc. Roy. Soc.* 1926. — Vol. 110. — P. 709.
76. *Montroll E. W., Scher H.* Random walks on lattices IV: continuous-time random walks and influence of absorbing boundary conditions // *J. Stat. Phys.* — 1973. — Vol. 9. — P. 101.
77. *Scher H., Montroll E. W.* Anomalous transit-time dispersion in amorphous solids // *Phys. Rev.* — 1975. — Vol. B 12. — P. 2455.
78. *Pfister G., Scher H.* Time-dependent electrical transport in amorphous solids: As_2Se_3 // *Phys. Rev.* — 1977. — Vol. B 15. — P. 2062.
79. *Pfister G., Scher H.* Dispersive (non-Gaussian) transient transport in disordered solids // *Adv. Phys.* — 1978. — Vol. 27. — P. 747.
80. *Zumofen G., Blumen A., Klafter J.* Current flow under anomalous-diffusion conditions: Lévy walks // *Phys. Rev.* — 1990. — Vol. A 41. — P. R4558.
81. *Blom P. W. M., Vissenberg M. C. J. M.* Dispersive hole transport in Poly (*p*-phenylene vinylene) // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — 80. — P. 3819.
82. *Scalas E., Gorenflo R., Mainardi F.* Uncoupled continuous-time random walks: solution and limiting behavior of the master equation // *Phys. Rev.* — 2004. — Vol. E 69. — P. 011107.
83. *Klafter J., Shlesinger M. F., Zumofen G.* Beyond Brownian motion // *Phys. Today.* — 1996. — Vol. 49. — P. 33.
84. *Монин А. С.* Уравнение турбулентной диффузии // *Докл. АН СССР.* — 1955. — Т. 105. — С. 256.
85. *Khintchine A., Lévy P.* Sur les lois stables // *CR Acad. Sci.* — 1936. — Vol. 202. — P. 374.
86. *Balakrishnan V.* Anomalous diffusion in one dimension // *Physica.* — 1985. — Vol. A 132. — P. 569.
87. *Wyss W.* The fractional diffusion equation // *J. Math. Phys.* — 1986. — Vol. 27. — P. 2782.
88. *Schneider W. R., Wyss W.* Fractional diffusion and wave equations // *J. Math. Phys.* — 1989. — Vol. 30. — P. 134.
89. *Зеленый Л. М., Милованов А. В.* Фрактальная топология и странная кинетика: от теории перколяции к проблемам космической электродинамики // *УФН.* — 2004. — Т. 174. — P. 809; см. также: *Учайкин В. В.* Автомодельная аномальная диффузия и устойчивые законы // *УФН.* — 2003. — Т. 173. — P. 847.

90. Metzler R., Klafter J. The random walk's guide to anomalous diffusion: a fractional dynamics approach // Phys. Rep. — 2000. — Vol. 339. — P. 1.
91. Montroll E. W., Weiss G. Random walks on lattices II // J. Math. Phys. — 1965. — Vol. 6. — P. 167.
92. Montroll E. W., Shlesinger M. F. A wonderful world of random walks // Studies in Statistical Mechanics / J. L. Lebowitz, E. W. Montroll (eds.). — Vol. 11. — Amsterdam, North-Holland, 1984.
93. Scher H., Lax M. Stochastic transport in a disordered solid. — I: Theory // Phys. Rev. — 1972. — Vol. B 7. — P. 4491, 4502.
94. Hilfer R., Anton L. Fractional master equations and fractal time random walks // Phys. Rev. — 1995. — Vol. E 51. — P. R848.
95. Compte A. Stochastic foundations of fractional dynamics // Phys. Rev. — 1996. — Vol. E 53. — P. 4191.
96. Sánchez R., Carreras B. A., van Milligen B. Ph. Fluid limit of nonintegrable continuous-time random walks in terms of fractional differential equations // Phys. Rev. — 2005. — E 71. — P. 011111.
97. Mandelbrot B. B., van Ness J. W. Fractional Brownian motion, fractional noises and applications // SIAM Rev. — 1968. — Vol. 10. — P. 422.
98. O'Shaughnessy B., Procaccia I. Analytical solutions for diffusion on fractal objects // Phys. Rev. Lett. — 1985. — Vol. 54. — P. 455.
99. Klafter J., Silbey R. Derivation of the Continuous-Time Random-Walk Equation // Phys. Rev. Lett. — 1980. — Vol. 44. — P. 55.
100. Klafter J., Blumen A., Shlesinger M. F. Stochastic pathway to anomalous diffusion // Phys. Rev. — 1987. — Vol. A 35. — P. 3081.
101. Barkai E., Fleurov V. Lévy walks and generalized stochastic collision models // Phys. Rev. — 1997. — Vol. E 56. — P. 6355.
102. Kutner R., Maass P. Lévy flights with quenched noise amplitudes // J. Phys. — 1998. — Vol. A 31. — P. 2603.
103. Bernasconi J., Schneider W. R. Diffusion and hopping conductivity in disordered one-dimensional lattice systems // W. Wyss, Zh. Phys. — 1980. — Vol. B 37. — P. 175.
104. Seshadri V., West B. J. Fractal dimensionality of Lévy processes // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. — 1982. — Vol. 79. — P. 4501.
105. West B. J., Seshadri V. Linear systems with Lévy fluctuations // Physica. — 1982. — Vol. A 113. — P. 203.
106. Peseckis F. Statistical dynamics of stable processes // Phys. Rev. — 1987. — Vol. A 36. — P. 892.
107. Fogedby H. C. Lévy flights in random environments // Phys. Rev. Lett. — 1994. — Vol. 73. — P. 2517.
108. Fogedby H. C. Langevin equations for continuous time Lévy flights // Phys. Rev. — 1994. — Vol. E 50. — P. 1657.

109. *Muralidhar R., Ramkrishna D., Nakanishi H., Jacobs D.* Anomalous diffusion: a dynamic perspective // *Physica*. — 1990. — Vol. A 167. — P. 539.
110. *Wang K. G., Dong L. K., Wu X. F.* et al. Correlation effects, generalized Brownian motion and anomalous diffusion // *Physica*. — 1994. — Vol. A 203. — P. 53.
111. *Wang K. G., Tokuyama M.* Nonequilibrium statistical description of anomalous diffusion // *Physica*. — 1999. — Vol. A 265. — P. 341.
112. *Kenkre V. M., Montroll E. W., Shlesinger M. F.* Generalized master equations for continuous-time random walks // *J. Stat. Phys.* — 1973. — Vol. 9. — P. 45.
113. *Kenkre V. M.* Generalization to spatially extended systems of the relation between stochastic Liouville equations and Generalized master equations // *Phys. Lett.* — 1978. — Vol. A 65. — P. 391.
114. *Bedeaux D., Lakatos K., Shuler K.* On the relation between master equations and random walks and their solutions // *J. Math. Phys.* — 1971. — Vol. 12. — P. 2116.
115. *Stochastic Processes in Chemical Physics: The Master Equation / I. Oppenheim, K. E. Shuler, G. H. Weiss (eds.)*. — Cambridge, Massachusetts: MIT Press, 1977.
116. *Tsallis C., Lévy S. V. F., Souza A. M. C., Maynard R.* Statistical-mechanical foundation of the ubiquity of Lévy distributions in nature // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 75. — P. 3589.
117. *Tsallis C., Bukman D.* Anomalous diffusion in the presence of external forces: exact time-dependent solutions and their thermostistical basis // *J. Phys. Rev.* — 1996. — Vol. E 54. — P. R2197.
118. *Borland L.* Microscopic dynamics of the nonlinear Fokker-Planck equation: a phenomenological model // *Phys. Rev.* — 1998. — Vol. E 57. — P. 6634.
119. *Compte A., Jou D.* Non-equilibrium thermodynamics and anomalous diffusion // *J. Phys.* — 1996. — Vol. A 29. — P. 4321.
120. *Zanette D. H., Alemany P. A.* Thermodynamics of anomalous diffusion // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 75. — P. 366.
121. *Lévy Flights and Related Topics in Physics / M. F. Shlesinger, G. M. Zaslavsky, U. Frish (Eds.)*. — Berlin: Springer, 1995. — (Lecture Notes in Physics; Vol. 450).
122. *Заславский Г. М.* Физика хаоса в гамильтоновых системах. — Москва; Ижевск: Ин-т. компьютер. исслед., 2004.
123. *Чукбар К. В.* Стохастический перенос и дробные производные // *ЖЭТФ*. — 1995. — Т. 108. — С. 1875.
124. *El-Nabulsi R.-A.* Fractional description of super and subdiffusion // *Phys. Lett.* — 2005. — Vol. A 340. — P. 361.

-
125. Гнеденко Б. В., Колмогоров А. Н. Предельные распределения для сумм независимых случайных величин. — М.; Л.: Гостехиздат, 1949.
 126. Барду Ф., Бушо Ж.-Ф., Аспе А., Коэн-Таннуджи К. Статистика Леви и лазерное охлаждение. — М.: Физматлит, 2006.
 127. Taylor G. I. Diffusion by continuous movements // Proc. London Math. Soc. Ser. 2. — 1921. — Vol. 20. — P. 196.
 128. Kolmogorov A. N. A refinement of the concept of the local structure of turbulence in a viscous incompressible fluid at high Reynolds numbers // J. Fluid Mech. — 1962. — Vol. 13. — P. 82.
 129. Shlesinger M. F., West B. J., Klafter J. Lévy dynamics of enhanced diffusion: application to turbulence // Phys. Rev. Lett. — 1987. — Vol. 58. — P. 1100.
 130. Бакунин О. Г. Корреляционные и перколяционные свойства турбулентной диффузии // УФН. — 2003. — Т. 173. — С. 757.
 131. Shraiman B. I., Siggia E. D. Scalar turbulence // Nature Vol. — 2000. — Vol. 405. — P. 639.
 132. Falkovich G., Gawedzki K., Vergassola M. Particles and fields in fluid turbulence // Rev. Mod. Phys. — 2001. — Vol. 73. — P. 913.
 133. Дрейзин Ю. А., Дыхне А. М. Аномальная проводимость неоднородных сред в сильном магнитном поле // ЖЭТФ. — 1972. — Т. 63. — С. 242.
 134. Дыхне А. М., Ханартович А. П. Перенос резонансного излучения в неоднородной плазме. — М.: Ин-т атом. энергии, 1970.
 135. Fisher D. S. Random walks in random environments // Phys. Rev. — 1984. — Vol. A 30. — P. 960.
 136. Кравцов В. Е., Лернер И. В., Юдсон В. И. Классическая диффузия в средах со слабым беспорядком // ЖЭТФ. — 1986. — Т. 91. — С. 569.
 137. Deem M. W. Field-theoretic approximations for normal diffusion in random velocity fields // Phys. Rev. — 1995. — Vol. E 51. — P. 4319.
 138. Fisher D. S., Friedan D., Quiet Z. et al. Random walks in two-dimensional random environments with constrained drift forces // Phys. Rev. — 1985. — Vol. A 31. — P. 3841.
 139. Aronovitz J. A., Nelson D. R. Anomalous diffusion in steady fluid flow through a porous medium // Phys. Rev. — 1984. — Vol. A 30. — P. 1948.
 140. Derrida B., Luck J. M. Diffusion on a random lattice: Weak-disorder expansion in arbitrary dimension // Phys. Rev. — 1983. — Vol. B 28. — P. 7183.
 141. Геворкян Ж. С., Лозовик Ю. Е. Классическая диффузия в случайном поле с дальними корреляциями / ФИАН, отд. теорет. физики. — М., 1986; см. также: Физ. тв. тела. — 1985. — Т. 27. — С. 1800.

142. *Bouchaud J.-P., Georges A.* Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models, and physical applications // *Phys. Rep.* — 1990. — Vol. 195. — P. 127.
143. *Matheron G., de Marsily G.* Is transport in porous media always diffusive? A counter example // *Water Resources Res.* — 1980. — Vol. 16. — P. 901.
144. *Koch D. L., Brady J. F.* Anomalous diffusion in heterogeneous porous media // *Phys. Fluids.* — 1988. — Vol. 31. — P. 965.
145. *Koch D. L., Brady J. F.* Anomalous diffusion due to long-range velocity fluctuations in the absence of a mean flow // *Phys. Fluids.* — 1989. — Vol. A 1. — P. 47.
146. *Blumen A., Klafter J., Zumofen G.* Models for reaction dynamics in glasses // *Optical Spectroscopy of Glasses.* — Reidel; Dordrecht, 1986.
147. *Scher H., Shlesinger M. F., Bendler J. T.* Time-scale invariance in transport and relaxation // *Phys. Today.* — 1991. — Vol. 44. — P. 26.
148. *Berkowitz B., Scher H.* Theory of anomalous chemical transport in fracture networks // *Phys. Rev.* — 1998. — Vol. E 57. — P. 5858.
149. *Alexander S., Bernasconi J., Schneider W. R., Orbach R.* Excitation dynamics in random one-dimensional systems // *Rev. Mod. Phys.* — 1981. — Vol. 53. — P. 175.
150. *Havlin S., ben-Avraham D.* Diffusion in disordered media // *Adv. Phys.* — 1987. — Vol. 36. — P. 695.
151. *Архинчев В. Е., Баскин Э. М.* Аномальная диффузия и дрейф в гребешковой модели перколяционных кластеров // *ЖЭТФ.* — 1991. — Т. 100. — P. 292.
152. *Haus J. W., Kehr K. W.* Diffusion in regular and disordered lattices // *Phys. Rep.* — 1987. — Vol. 150. — P. 263.
153. *Hanggi P., Thomas H.* Stochastic processes: time evolution, symmetries and linear response // *Phys. Rep.* — 1982. — Vol. 88. — P. 207.
154. *Grifoni M., Hanggi P.* Driven quantum tunneling // *Phys. Rep.* — 1998. — Vol. 304. — P. 229.
155. *West B. J., Deering W.* Fractal physiology for physicists: Lévy statistics // *Phys. Rep.* — 1994. — Vol. 246. — P. 1.
156. *Balesku R.* *Statistical Dynamics, Matter out of Equilibrium.* — London: Imperial College Press, 1997.
157. *Shlesinger M. F., Zaslavsky G. M., Klafter J.* Strange kinetics // *Nature.* — 1993. — Vol. 363. — P. 31—33.
158. *Weiss G. H.* *Aspects and Applications of the Random Walks.* — Amsterdam, North-Holland, 1994.
159. *Anomalous Diffusion, from Basics to Applications / R. Kutner, A. Pekalski, K. Sznajd-Weron (eds.).* — Berlin: Springer, 1999. — (Lecture Notes in Physics; Vol. 519).

-
160. Chaos, Kinetics and Nonlinear Dynamics in Fluids and Plasmas / G. M. Zaslavsky, S. Benkadda (eds.). — Berlin: Springer, 1998. — (Lecture Notes in Physics; Vol. 511).
 161. *Batchelor G. K.* The application of the similarity theory of turbulence to atmospheric diffusion // *Quart. J. Roy. Meteor. Soc.* — 1950. — Vol. 76. — P. 133.
 162. *Sokolov I., Blumen A.* Drude approach to anomalous diffusion: application to Richardson dispersion in turbulent flow // *J. Klafter, Europhys. Lett.* — 1999. — Vol. 47. — P. 152.
 163. *Klafter J., Blumen A., Zumofen G., Shlesinger M. F.* Lévy walks approach to anomalous diffusion // *Physica.* — 1990. — Vol. A 168. — P. 637.
 164. *Ott A., Bouchaud J.-P., Langevin D., Urbach W.* Anomalous diffusion in “living polymers”: a genuine Lévy flight? // *Phys. Rev. Lett.* — 1990. — Vol. 65. — P. 2201.
 165. *Sahimi M.* Non-linear and non-local transport processes in heterogeneous media: from long-range correlated percolation to fracture and materials breakdown // *Phys. Rep.* — 1998. — Vol. 306. — P. 214.
 166. *Balescu R.* Anomalous transport in turbulent plasmas and continuous time random walks // *Phys. Rev.* — 1995. — Vol. E 51. — P. 4807.
 167. *Klafter J., White B. S., Levandowsky M.* Microzooplankton feeding behaviour and the Lévy walks // *Biological Motion, Lecture Notes in Biomathematics / W. Alt, J. Hoffmann (eds.).* — Vol. 89. — Berlin: Springer, 1990.
 168. *Viswanathan G. M., Afanasyev V., Buldyrev S. V. et al.* Lévy flight search patterns of wandering albatrosses // *Nature.* — 1996. — Vol. 381. — P. 413.

Глава 1. Аномальная диффузия в простых физических моделях

1.1. Модель случайной адвекции. Нулевая средняя скорость

Случайная адвекция в поле скоростей с дальнедействующими корреляциями — простейший физический механизм, способный привести к супердиффузионному режиму переноса. В рамках этой модели в настоящей главе проанализировано поведение концентрации примеси во всем диапазоне изменения координат и времени. Особое внимание уделено структуре асимптотики концентрации на далеких расстояниях. Использован анализ масштабных размерностей.

Доминирующий механизм переноса примеси в скальных породах — адвекция за счет фильтрации влаги по трещинам. Поскольку геометрия трещин является фрактальной, возникают предпосылки для дальнедействующих корреляций. Поэтому задачи, решаемые в этом и следующих разделах, отражают один из ключевых моментов, определяющих перенос примесей в геологических средах.

Структура раздела такова. В подразделе 1.1.1 сформулирована задача. Подраздел 1.1.2 посвящен выводу основных соотношений, вытекающих из анализа группы масштабных преобразований. В подразделе 1.1.3 выяснены общие закономерности поведения концентрации в зависимости от координат и времени при различных закономерностях убывания пространственных корреляций скорости адвекции. В подразделе 1.1.4 исследуются асимптотические зависимости концентрации на больших расстояниях от источника.

1.1.1. Постановка задачи

Основу модели составляет уравнение для концентрации примеси $c(\vec{r}, t)$:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\vec{v}c) = 0, \quad (1.1.1)$$

где $\vec{v} = \vec{v}(\vec{r})$ — скорость адвекции; \vec{r} — расстояние. Величина $\vec{v}(\vec{r})$ является случайной функцией координат, причем среднее значение по ансамблю реализаций $\langle \vec{v}(\vec{r}) \rangle = 0$.

Поле скоростей удовлетворяет уравнению несжимаемости

$$\operatorname{div} \vec{v}(\vec{r}) = 0. \quad (1.1.2)$$

Мы полагаем, что корреляции флуктуаций скорости на больших расстояниях убывают по степенным законам. В частности, парный коррелятор

$$K_{ij}^{(2)}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) = \langle v_i(\vec{r}_1) v_j(\vec{r}_2) \rangle \quad (1.1.3)$$

обладает следующими свойствами:

$$K_{ij}^{(2)}(\vec{r}) \propto \begin{cases} V^2 \left(\frac{a}{r}\right)^{2h} & \text{при } r \gg a, \\ V^2 & \text{при } r \leq a, \end{cases} \quad (1.1.4)$$

где $h > 0$; a — параметр длины, имеющий смысл нижней границы фрактального интервала; V — параметр, имеющий размерность скорости. Таким образом, при $r \gg a$ величина $K_{ij}^{(2)}(\vec{r})$ является однородной функцией своего аргумента порядка $-2h$. Аналогично n -точечный коррелятор скоростей, определенный формулой

$$K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \langle v_{i_1}(\vec{r}_1) v_{i_2}(\vec{r}_2) \dots v_{i_n}(\vec{r}_n) \rangle, \quad (1.1.5)$$

в области $|\vec{r}_i - \vec{r}_j| \gg a$ (для всех пар переменных \vec{r}_i, \vec{r}_j) удовлетворяет соотношению

$$K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\lambda \vec{r}_1, \lambda \vec{r}_2, \dots, \lambda \vec{r}_n) = \lambda^{-nh} K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n), \quad (1.1.6)$$

где λ — произвольное вещественное положительное число.

В соответствии с (1.1.6) для Фурье-образа n -точечного коррелятора

$$\begin{aligned} & K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}\{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_n\} = \\ & = \int d^3 \vec{r}_1 d^3 \vec{r}_2 \dots d^3 \vec{r}_n \exp\left[-i(\vec{k}_1 \vec{r}_1 + \vec{k}_2 \vec{r}_2 + \dots + \vec{k}_n \vec{r}_n)\right] K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_n) = \\ & = (2\pi)^3 \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 + \dots + \vec{k}_n) \tilde{K}_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)}\{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_{n-1}\} \end{aligned} \quad (1.1.7)$$

справедливо масштабное соотношение

$$K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)} \{ \lambda \vec{k}_1, \lambda \vec{k}_2, \dots, \lambda \vec{k}_n \} = \lambda^{n(h-3)} K_{i_1 i_2 \dots i_n}^{(n)} \{ \vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_n \}. \quad (1.1.8)$$

Из равенств (1.1.4) и (1.1.8) вытекает, что в области малых волновых векторов ($ka \ll 1$, $k \equiv |\vec{k}|$) Фурье-образ парного коррелятора имеет вид

$$\tilde{K}_{ij}^{(2)} \{ \vec{k} \} \sim V^2 a^{2h} k^{2h-3}. \quad (1.1.9)$$

Аналогичным образом при малых волновых векторах ведут себя и корреляционные функции более высоких порядков. В области больших волновых векторов ($ka > 1$) с ростом k корреляционные функции быстро убывают.

1.1.2. Масштабный анализ

Макроскопическое уравнение переноса. Практический интерес представляет распределение концентрации, усредненное по ансамблю реализаций среды, $\bar{c}(\vec{r}, t) = \langle c(\vec{r}, t) \rangle$. Для него справедливо стандартное макроскопическое уравнение

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \text{div} \bar{q} = 0, \quad (1.1.10)$$

где $\bar{q}(\vec{r}, t)$ — усредненная плотность потока частиц, удовлетворяющая очевидному требованию обращаться в нуль при однородном распределении концентрации. С учетом линейности задачи и принципа причинности имеем

$$q_i(\vec{r}, t) = - \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{r}' f_{ij}(\vec{r}', t') \frac{\partial \bar{c}(\vec{r} - \vec{r}', t - t')}{\partial r_j}. \quad (1.1.11)$$

Здесь и далее будем рассматривать задачу с начальным условием $\bar{c}(\vec{r}, 0) = c^{(0)}(\vec{r})$ в отсутствие источника, так что средняя концентрация и ее начальное значение связаны соотношением

$$\bar{c}(\vec{r}, t) = \int d^3 \vec{r}' G(\vec{r} - \vec{r}', t) c^{(0)}(\vec{r}'). \quad (1.1.12)$$

Функция Грина $G(\vec{r}, t)$ в представлении Фурье — Лапласа

$$G\{\bar{k}, p\} = \int_0^{\infty} dt \int d^3\bar{r} e^{-pt - i\bar{k}\bar{r}} G(\bar{r}, t) \quad (1.1.13)$$

в соответствии с (1.1.10) и (1.1.11) дается выражением

$$G\{\bar{k}, p\} = \left[p - M(\bar{k}, p) \right]^{-1}, \quad (1.1.14)$$

где

$$M(\bar{k}, p) = -k_i k_j \int_0^{\infty} dt e^{-pt} \int d^3\bar{r} e^{-i\bar{k}\bar{r}} f_{ij}(\bar{r}, t). \quad (1.1.15)$$

В соотношениях (1.1.13)—(1.1.15) \bar{k} — волновой вектор; p — переменная Лапласа.

Решения уравнения переноса, получающегося подстановкой (1.1.11) в (1.1.10), обязаны удовлетворять очевидному физическому требованию — быть устойчивыми. Условие, необходимое для этого, состоит в отсутствии полюсов функции Грина $G\{\bar{k}, p\}$ при действительных значениях волнового вектора и действительных положительных значениях переменной Лапласа:

$$G^{-1}\{\bar{k}, p\} \neq 0 \text{ при } \text{Im}\{\bar{k}, p\} = 0, p > 0. \quad (1.1.16)$$

Масштабные размерности. В принятой модели (см. (1.1.4)) не существует пространственного масштаба, характеризующего поведение системы при $r \gg a$. Это обстоятельство позволяет использовать идеи теории критических явлений [1] и потребовать масштабной инвариантности макроскопического уравнения переноса на расстояниях $r \gg a$. Иными словами, это уравнение должно переходить само в себя при масштабном преобразовании

$$\bar{r} \rightarrow \lambda \bar{r}.$$

При этом величины, входящие в (1.1.10) и (1.1.11), преобразуются согласно

$$A \rightarrow \lambda^{-\Delta_A} A, \quad (1.1.17)$$

где показатель Δ_A называется масштабной размерностью величины A .

Из (1.1.4) и свойства сохранения полного числа частиц вытекают значения масштабных размерностей скорости, концентрации и функции Грина:

$$\Delta_v = h, \quad \Delta_c = \Delta_G = 3. \quad (1.1.18)$$

Уравнение (1.1.10) вместе с соотношением (1.1.11) позволяют связать масштабные размерности времени и плотности потока:

$$\Delta_t = 2 - \Delta_q. \quad (1.1.19)$$

Размерности плотности потока и времени находим из тождества $\vec{q} = \langle \vec{v}c \rangle$ с учетом (1.1.18) и (1.1.19):

$$\Delta_q = h + 3, \quad (1.1.20)$$

$$\Delta_t = -(1 + h). \quad (1.1.21)$$

Из равенств (1.1.11), (1.1.20) и (1.1.21) находим масштабную размерность функции $f_{ij}(\vec{r}, t)$:

$$\Delta_f = 2h + 3. \quad (1.1.22)$$

Отметим, что результаты этого раздела справедливы при условии, что свойства переноса определяются дальнедействующей ($r \gg a$) частью корреляций скорости (см. ниже).

1.1.3. Общие закономерности поведения концентрации

С учетом (1.1.21) и (1.1.22) функцию $f_{ij}(\vec{r}, t)$ можно представить в виде

$$f_{ij}(\vec{r}, t) = \frac{(Va^h)^2}{r^{2h+3}} \chi_{ij} \left(\vec{n}, \frac{r}{(Va^h t)^{1/(1+h)}} \right) \quad \text{при } r \gg a, \quad (1.1.23)$$

$$f_{ij}(\vec{r}, t) \sim \frac{V^2}{a^3} \quad \text{при } r \leq a. \quad (1.1.24)$$

Величина χ_{ij} , входящая в (1.1.23), является безразмерной тензорной функцией, а $\vec{n} = \frac{\vec{r}}{r}$.

Обратимся теперь к свойствам функции Грина (и соответственно к поведению концентрации) в зависимости от значения h . Отдельно рассмотрим случаи $h > 1$, $h < 1$ и $h = 1$.

1. $h > 1$. Как видно из выражений (1.1.23) и (1.1.24), при $h > 1$ основной вклад в интеграл (1.1.15) дает область $r \sim a$, $t \sim a/V$. При этом функция $f_{ij}(\vec{r}, t)$ определяется оценкой (1.1.24). Поскольку нас интересует крупномасштабное распределение концентрации ($r \gg a$, $t \gg a/V$), в подынтегральном выражении (1.1.15) можно положить $\exp(-ikr - pt) \cong 1$. Таким образом, для $h > 1$ получаем

$$M = -Dk^2, \quad D \sim Va \text{ при } h > 1. \quad (1.1.25)$$

Переход отсюда с учетом (1.1.13) и (1.1.14) в координатно-временное представление приводит к классическому уравнению диффузии

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} - D\Delta \bar{c} = 0.$$

Таким образом, при $h > 1$ перенос происходит в режиме классической диффузии. Отметим, что классический скейлинг $\Delta_c = -2$ отличается от вытекающего из (1.1.21) при $h > 1$. Это неудивительно, поскольку, как мы только что убедились, перенос при $h > 1$ определяется корреляционными свойствами скорости на малых расстояниях $r \sim a$, где масштабная инвариантность, необходимая для выполнения равенства (1.1.20), отсутствует.

2. $h < 1$. Из (1.1.23) и (1.1.24) следует, что основной вклад в интеграл (1.1.15) при $h < 1$ дается областью больших расстояний ($r \gg a$). Поэтому для функции $f_{ij}(\vec{r}, t)$ под интегралом в (1.1.15) можно воспользоваться выражением (1.1.23). Функция $M(\vec{k}, p)$ тогда приобретает вид

$$M(\vec{k}, p) = -k_i k_j (Va^h)^2 \int_0^\infty dt e^{-pt} \int d^3 \vec{r} \frac{e^{-i\vec{k}\vec{r}}}{r^{3+2h}} \chi_{ij} \left(\vec{n}, \frac{r}{(Va^h t)^{1/(1+h)}} \right), \quad (1.1.26)$$

$h < 1$.

Вместо \vec{r} и t перейдем к новым переменным интегрирования

$$y = kr, \quad \xi = \frac{r}{(Va^h t)^{1/(1+h)}}.$$

В результате выражение (1.1.26) преобразуется к виду

$$M(\vec{k}, p) = -(1+h)Va^h k^{1+h} m_i m_j \int d\Omega_{\vec{n}} \int_0^\infty \frac{dy}{y^h} e^{-iy(\vec{m}\vec{n})} \times \int_0^\infty \frac{d\xi}{\xi^{2+h}} \chi_{ij}(\vec{n}, \xi) \exp\left\{-\left(\frac{y}{\xi\sqrt{\eta}}\right)^{1+h}\right\}, \quad (1.1.27)$$

где $d\Omega_{\vec{n}}$ — элемент телесного угла в направлении вектора $\vec{n} \equiv \frac{\vec{r}}{r}$; $\vec{m} = \frac{\vec{k}}{k}$.

Переменная η определяется равенством

$$\eta = k^2 \left(\frac{p}{Va^h}\right)^{-\frac{2}{1+h}}. \quad (1.1.28)$$

Отметим, что для сходимости интеграла в (1.1.27) при $\xi \rightarrow 0$ и любых значениях η необходимо, чтобы при $\xi \rightarrow 0$ имело место $\chi_{ij} \propto o(\xi^{1+h})$, т. е.

$f_{ij}(\vec{r}, t) \propto o\left(\frac{1}{t}\right)$ при $t \rightarrow \infty$ и фиксированном r . Это мягкое условие на

быстроту забывания прошлого (в некотором смысле слабую марковость) мы будем считать выполненным. Отметим также, что сходимость интеграла по переменной y в (1.1.27) при $h < 1$ является очевидной.

Из (1.1.14) с учетом (1.1.27) и (1.1.28) получаем следующее представление для функции Грина:

$$G(\vec{k}, p) = \frac{1}{p[1+\varphi(\eta)]}, \quad (1.1.29)$$

где $\varphi(\eta) =$

$$= -(1+h)\eta^{\frac{1+h}{2}} m_i m_j \int d\Omega_{\vec{n}} \int_0^\infty \frac{dy}{y^h} e^{-iy(\vec{m}\vec{n})} \int_0^\infty \frac{d\xi}{\xi^{2+h}} \chi_{ij}(\vec{n}, \xi) \exp\left\{-\left(\frac{y}{\xi\sqrt{\eta}}\right)^{1+h}\right\}. \quad (1.1.30)$$

Полезно также, произведя замену переменной $y \rightarrow y\xi\sqrt{\eta}$, переписать соотношение (1.1.30) в следующей форме:

$$\begin{aligned} \varphi(\eta) = & -(1+h)\eta m_i m_j \int d\alpha_{\bar{n}} \int_0^\infty \frac{dy}{y^h} \exp\left[-iy(\bar{m}\bar{n})\xi\sqrt{\eta}\right] \times \\ & \times \int_0^\infty \frac{d\xi}{\xi} \chi_{ij}(\bar{n}, \xi) \exp\{-y^{1+h}\}. \end{aligned} \quad (1.1.31)$$

Рассмотрим свойства функции $\varphi(\eta)$. Из выражения (1.1.31) следует, что при малых значениях аргумента она является аналитической, причем регулярное разложение начинается с члена, пропорционального η :

$$\varphi(\eta) = \sum_{n=1}^{\infty} a_n \eta^n \quad \text{при } \eta \ll 1. \quad (1.1.32)$$

С другой стороны, из (1.1.30) видно, что при больших значениях аргумента функция $\varphi(\eta)$ имеет вид

$$\varphi(\eta) \sim \eta^{\frac{1+h}{2}} \quad \text{при } \eta \gg 1. \quad (1.1.33)$$

Такая дробно-степенная асимптотика свидетельствует, что при конечном ненулевом значении переменной η функция $\varphi(\eta)$ имеет точку ветвления. Поскольку при действительных положительных η она сама является вещественной, точка ветвления должна быть действительной и отрицательной, $\eta = \eta_b < 0$. Принимая во внимание регулярный множитель η в равенстве (1.1.31) справа, с учетом асимптотики (1.1.33) приходим к выводу, что при $\eta \rightarrow \eta_b$ функция $\varphi(\eta)$ имеет структуру

$$\varphi(\eta) \sim \eta(\eta - \eta_b)^{-\frac{1-h}{2}} \quad \text{при } |\eta - \eta_b| \ll 1. \quad (1.1.34)$$

Отсюда следует, что вблизи точки ветвления $\varphi(\eta)$ стремится к бесконечности.

Рассмотрим действительные неотрицательные η . Из (1.1.16) следует, что выражение $1 + \varphi(\eta)$ (принимаяющее тоже действительные положительные значения) не обращается в нуль при таких η . Учитывая, что справа вблизи $\eta = \eta_b$ ($\eta_b < 0$) функция $\varphi(\eta)$ стремится к минус бесконечности (см. (1.1.34)), приходим к выводу, что выражение $1 + \varphi(\eta)$ имеет хотя бы

один нуль при отрицательном η таком, что $|\eta| < |\eta_b|$. Обозначим η_0 ближайший из них к началу координат ($\eta_0 < 0$ и $|\eta_0| < |\eta_b|$).

В дальнейшем нас будут интересовать свойства распределения концентрации на временах, когда размер основной области локализации примеси много больше первоначального размера: $R(t) \gg R(0)$. Тогда согласно (1.1.12) находим

$$\bar{c}(\vec{r}, t) \cong NG(\vec{r}, t), \quad R(t) \gg R_0, \quad (1.1.35)$$

где $N = \int d^3rc^{(0)}(\vec{r}) = \int d^3r\bar{c}(\vec{r}, t)$ — полное число частиц.

Переходя в (1.1.14) с учетом (1.1.29) в координатно-временное представление и используя (1.1.35), приходим к равенству

$$\bar{c}(\vec{r}, t) = N \int_{p_0 - i\infty}^{p_0 + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{pt + i\vec{k}\vec{r}}}{p(1 + \varphi(\eta))}, \quad \text{Re } p_0 > 0, \quad (1.1.36)$$

где переменная η определена (1.1.28).

Переходя в (1.1.36) от интегрирования по p и \vec{k} к безразмерным переменным согласно

$$\begin{aligned} p &\rightarrow \bar{p} = pt, \\ k &\rightarrow \bar{k} = kR(t)\bar{p}^{-\frac{1}{1+h}}, \end{aligned} \quad (1.1.37)$$

$$R(t) = (Va^h t)^{1/(1+h)}, \quad (1.1.38)$$

получаем

$$\bar{c}(\vec{r}, t) = \frac{N}{R^3(t)} \Phi(\xi), \quad (1.1.39)$$

где функция $\Phi(\xi)$ определяется выражением

$$\Phi(\xi) = \int_{\bar{p}_* - i\infty}^{\bar{p}_* + i\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi i} \bar{p}^{\frac{2-h}{1+h}} \int d\omega_{\vec{m}} \int_0^\infty \frac{\bar{k}^2 d\bar{k}}{(2\pi)^3} \frac{\exp\left\{\bar{p} + i\bar{k}\xi\bar{p}^{\frac{1}{1+h}}(\vec{m}\vec{n})\right\}}{1 + \phi(\bar{k}^2)}, \quad (1.1.40)$$

$\text{Re } \bar{p}_* > 0$,

в котором

$$\xi = \frac{r}{R(t)}, \quad (1.1.41)$$

$d\omega_{\vec{m}}$ — элемент телесного угла в направлении единичного вектора \vec{m} .
Функция $\Phi(\xi)$ обладает свойствами

$$\Phi(0) \sim 1, \quad \Phi(\xi) \Big|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow 0.$$

Величина $R(t)$ в (1.1.41), данная (1.1.38), определяет по порядку величины размер области локализации в момент t (при $R(t) \gg R_0$). Показатель γ в зависимости $R(t) \propto t^\gamma$ равен $1/(1+h)$. Следовательно, при $h < 1$ имеет место $\gamma > 1/2$, и в этом случае перенос примеси происходит в режиме супердиффузии.

3. $h = 1$. Попытка рассмотреть этот случай как предел $h \rightarrow 1$ с использованием функции отклика (1.1.23) приводит к логарифмической расходимости в (1.1.11). Отсюда заключаем, что классическая автономная переменная $\xi \sim r/\sqrt{Dt}$ с $D \sim Va$, от которой решение зависело при $h > 1$, должна быть модифицирована слабой функцией координат логарифмического типа:

$$\xi = r/\sqrt{D(r)t}. \quad (1.1.42)$$

Это означает, что при $r \lesssim R(t)$ и $R(t) \gg R(0)$ соотношение между плотностью потока $\vec{q}(\vec{r}, t)$ и концентрацией должно иметь форму

$$\vec{q}(\vec{r}, t) = -D(r)\nabla\bar{c}(\vec{r}, t) \quad (1.1.43)$$

с координатой \vec{r} , отсчитанной от центра начального распределения частиц. Подставляя (1.1.42) в выражение (1.1.23), а затем последнее — в (1.1.11), находим из (1.1.43)

$$\frac{dD(r)}{dr} \sim \frac{(Va)^2}{rD(r)}. \quad (1.1.44)$$

Отсюда следует

$$D(r) = \tilde{D} \ln^{1/2} \left(\frac{r}{a} \right), \quad \tilde{D} \sim Va. \quad (1.1.45)$$

Подставляя в (1.1.42), получаем оценку для размера области локализации частиц на больших временах:

$$R(t) \sim \sqrt{\tilde{D}t} \ln^{1/4} \left(\frac{\sqrt{\tilde{D}t}}{a} \right). \quad (1.1.46)$$

Подставляя (1.1.42) и (1.1.45) в (1.1.26), находим выражение для поляризационного оператора при действительных и положительных значениях переменных p и k :

$$M(\bar{k}, p) \cong -\tilde{D}k^2 \ln^{1/2} \mu, \quad \tilde{D} \sim Va, \\ \mu = \min \left\{ (ka)^{-1}, \sqrt{\frac{\tilde{D}}{a^2 p}} \right\}. \quad (1.1.47)$$

Подстановка этого выражения в (1.1.14) с последующим выполнением обратного преобразования Фурье — Лапласа и с учетом (1.1.35) приводит к выражению для концентрации на достаточно больших ($R(t) \gg R(0)$) временах при $h = 1$

$$\bar{c}(\bar{r}, t) \cong \frac{N}{\left\{ 4\pi\tilde{D}t \ln^{1/2} \frac{\tilde{D}t}{a} \right\}^{3/2}} \exp \left\{ -\frac{r^2}{4\tilde{D}t \ln^{1/2} \frac{\tilde{D}t}{a}} \right\}, \quad (1.1.48)$$

которое справедливо в логарифмическом приближении.

Таким образом, при масштабной размерности скорости $h = 1$ перенос примеси происходит в логарифмически модифицированном классическом режиме.

1.1.4. Асимптотические профили концентрации

Проанализируем асимптотическое поведение концентрации на расстояниях, больших по сравнению с размером основной области локализации, т. е. при значениях автомодельной переменной $\xi = r/R(t) \gg 1$. При масштабных размерностях скорости $h > 1$ и $h = 1$ асимптотическое поведение определяется общими формулами для концентрации в этих случаях (для

$h = 1$ — формула (1.1.48)). В обоих случаях асимптотики являются гауссовыми:

$$\bar{c}(\bar{r}, t) \propto \exp\{-\xi^2\}$$

с тем лишь различием, что при $h > 1$ имеем $\xi = r / \sqrt{4Dt}$, а при $h = 1$ — $\xi = r / \sqrt{4\tilde{D}t \ln^{1/2}(\tilde{D}t/a)}$.

Займемся теперь выяснением асимптотической структуры концентрации при $h < 1$. Выполнив в выражении (1.1.40) интегрирование по угловым переменным с учетом четности по \bar{k} множителя при экспоненте, приходим к равенству

$$\Phi(\xi) = \frac{1}{\xi} \int_{\bar{p}_* - i\infty}^{\bar{p}_* + i\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi i} \bar{p}^{\frac{1-h}{1+h}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{k} d\bar{k}}{(2\pi)^2 i} \frac{\exp\left\{\bar{p} + i\bar{k}\xi \bar{p}^{\frac{1}{1+h}}\right\}}{1 + \phi(\bar{k}^2)}, \quad (1.1.49)$$

$$\operatorname{Re} \bar{p}_* > 0.$$

В предыдущем разделе было показано, что функция $1 + \phi(\eta)$ имеет нуль при $\eta = \eta_0$. Величина η_0 действительна, отрицательна и меньше по абсолютной величине, чем точка ветвления η_b ; при этом η_0 обозначен самый близкий к $\eta = 0$ нуль функции $1 + \phi(\eta)$. Учитывая, что η_b является самой близкой к $\eta = 0$ особенностью функции $\phi(\eta)$, приходим к выводу, что в плоскости переменной \bar{k} ближайшими к действительной оси особенностями подынтегрального выражения в (1.1.49) являются полюсы $\bar{k}_0 = \pm i\sqrt{|\eta_0|}$. Они и определяют асимпотику функции $\Phi(\xi)$ при $\xi \gg 1$.

Сдвигая контур интегрирования по переменной \bar{k} в верхнюю полуплоскость, как показано на **рис. 1.1.1**, находим:

$$\Phi(\xi) \cong \frac{1}{4\pi\phi'_0 \xi} \int_{\bar{p}_* - i\infty}^{\bar{p}_* + i\infty} \frac{d\bar{p}}{2\pi i} \bar{p}^{\frac{1-h}{1+h}} \exp\{-\Gamma(\bar{p})\}, \quad \operatorname{Re} \bar{p}_* > 0, \quad (1.1.50)$$

где

$$\Gamma(\bar{p}) = \xi \sqrt{|\eta_0|} \bar{p}^{\frac{1}{1+h}} - \bar{p}, \quad \phi'_0 = \left. \frac{d\phi}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_0}. \quad (1.1.51)$$

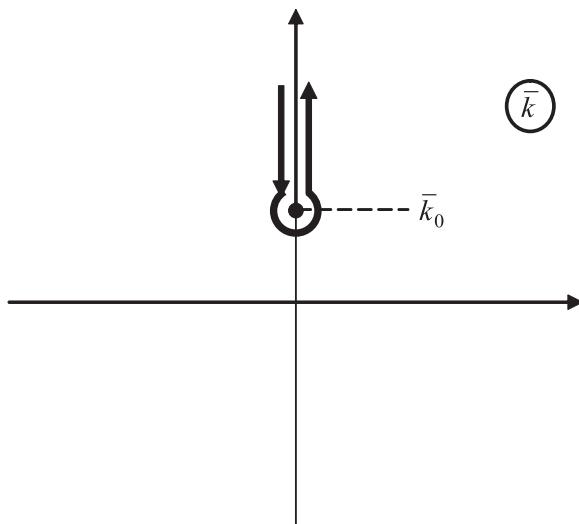


Рис. 1.1.1. Контур интегрирования по \bar{k} в (1.1.49), сдвинутый в верхнюю полуплоскость

Вычисляя оставшийся в (1.1.50) интеграл по переменной \bar{p} методом перевала (см. [2; 3]), приходим к выражению

$$\Phi(\xi) \cong \frac{1}{(4\pi)^{3/2} \Phi'_0 \xi} \sqrt{\frac{2}{|\Gamma''_0|}} \bar{p}_0^{(1-h)/(1+h)} \exp\{-\Gamma\}. \quad (1.1.52)$$

Здесь \bar{p}_0 — точка перевала, определяемая уравнением

$$\left. \frac{d\Gamma(\bar{p})}{d\bar{p}} \right|_{\bar{p}=\bar{p}_0} = 0. \quad (1.1.53)$$

Другие обозначения, использованные в (1.1.52), таковы:

$$\Gamma = \Gamma(\bar{p}_0), \quad \Gamma'' = \left. \frac{d^2\Gamma(\bar{p})}{d\bar{p}^2} \right|_{\bar{p}=\bar{p}_0}. \quad (1.1.54)$$

Решение уравнения (1.1.53) с учетом (1.1.51) дает

$$\bar{p}_0 = \left(\xi \frac{\sqrt{|\Gamma_0|}}{1+h} \right)^{\frac{1+h}{h}}. \quad (11.55)$$

Раскрывая с помощью (1.1.55) равенства (1.1.54), подставляя их затем в (1.1.52), а после этого результат — в (1.1.39), находим асимптотику концентрации при $\bar{\xi} \gg 1$:

$$\bar{c}(\bar{r}, t) \cong \frac{A}{\{4\pi R^2(t)\}^{3/2}} \varepsilon^{3(1-2h)/2h} \exp\left(-h\varepsilon \frac{1+h}{h}\right), \quad (1.1.56)$$

где

$$A = \sqrt{\frac{2|\eta_0|}{h(1+h)}} \frac{1}{\phi'_0}, \quad \varepsilon = \xi \frac{\sqrt{|\eta_0|}}{1+h}, \quad \phi'_0 = \left. \frac{d\phi}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_0}. \quad (1.1.57)$$

Поскольку при $h < 1$ имеем $(1+h)/h > 2$, хвост концентрации в модели случайной адвекции при $h < 1$ согласно (1.1.56) имеет вид экспоненты, более сжатой, чем гауссиана. Другими словами, концентрация в режиме супердиффузии убывает даже быстрее, чем при классической диффузии. Этот вывод резко отличается от выводов дробно-диффузионной (с дробной производной по пространству) модели, где хвосты ведут себя степенным образом.

На наш взгляд, это расхождение неслучайно. В самом деле, физическая по своей природе модель случайной адвекции учитывает, что распределение скоростей определяется функционалом, убывающим на больших абсолютных величинах очень круто (по существу поле скорости ограничено по величине). Это следует непосредственно из факта существования корреляционных функций скорости (т. е. моментов функционала распределения) сколь угодно высокого порядка. В результате медленное степенное убывание концентрации на больших расстояниях оказывается невозможным, несмотря даже на то, что корреляторы скоростей спадают самым медленным из возможных (если не считать логарифмического) степенным образом. Модель же дробной диффузии, будучи чисто математической, указанный физический принцип игнорирует, и, соответственно, ограничения на характер убывания концентрации на больших расстояниях в ней нет.

На **рис. 1.1.2** изображены асимптотические зависимости концентрации в исследованной здесь нами модели случайной адвекции, а также в моделях дробной диффузии и классической диффузии. Видно, что различие между предсказаниями разных моделей для концентрации на больших расстояниях $r \gg R(t)$ (т. е. при $\bar{\xi} \gg 1$) достигает многих порядков.

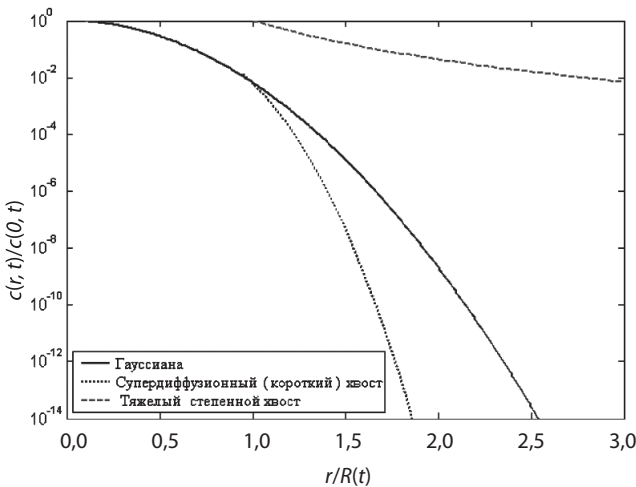


Рис. 1.1.2. Асимптотические профили концентрации в трех моделях: классической диффузии (гауссиана), случайной адвекции при $h = 0,5$ (супердиффузионный (короткий) хвост) и дробной диффузии (тяжелый степенной хвост)

1.2. Прямое численное моделирование стохастической адвекции

В разделе 1.1 рассмотрена одна из математических моделей, дающая адекватное описание распространения примеси в зоне полного влагонасыщения. Эта модель трактует перенос радионуклидов как адвекцию на случайном поле скоростей. Математически такой процесс в случае двух пространственных измерений можно записать следующим образом:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \text{div}(\bar{c}\varphi) = 0, \quad \text{div} \bar{c} = 0,$$

где φ — концентрация переносимой консервативной примеси; \bar{c} — вектор случайного поля скоростей. Характер переноса в такой модели полностью определяется стохастическими свойствами поля скоростей и зависит от степени убывания соответствующей корреляционной функции с расстоянием.

Выше было показано, что на различных классах корреляционных функций стохастический адвективный перенос обладает и классическими, и неклассическими свойствами, в частности, при некоторых параметрах

описывается как субдиффузия, так и супердиффузия. Особый интерес вызывает поведение в такой модели так называемых хвостов функции распределения примеси, характер их убывания на больших расстояниях.

Техника получения теоретических оценок, определяющих характер переноса в модели стохастической адвекции, достаточно сложна и вряд ли может быть в полном объеме применена к случаю зоны неполного влагонасыщения, представляющему основной интерес. Здесь нужны более универсальные методы, допускающие существенные усложнения исходной модели. Поэтому весьма интересным представляется вопрос о возможности прямого компьютерного стохастического моделирования таких процессов.

Прямое моделирование стохастического переноса радионуклидов в сильнонеоднородных случайных средах требует принципиального решения по крайней мере двух проблем. Первая связана с построением алгоритмов генерации на расчетных сетках случайных полей с заданными статистическими свойствами и установлением их связи с распределениями сетей трещин в горных породах. Эту проблему можно назвать задачей конструирования «электронного представления» (по аналогии с понятием «электронного документа») изучаемой неоднородной геологической среды.

Вторая проблема связана с тем, что далеко не всякий вычислительный алгоритм решения уравнения адвекции-диффузии может быть использован в качестве средства математического моделирования переноса примеси на сильнонеоднородной среде, характеризующейся отсутствием гладкости у случайных распределений. Кроме того, любая вычислительная схема обладает ошибками аппроксимации, которые могут принципиально исказить картину изучаемого явления.

Помимо перечисленных проблем возникает еще один чисто практический вопрос: достаточно ли имеющихся в распоряжении исследователя вычислительных ресурсов для того, чтобы исследуемые статистические свойства процесса проявились в той мере, чтобы их было можно надежно диагностировать?

Основной целью работы, результаты которой описаны в данном разделе, является исследование возможностей прямого численного стохастического моделирования процессов переноса в сильнонеоднородных средах на примере двумерной задачи о стохастической адвекции. Эта задача выбрана в основном потому, что она достаточно подробно и глубоко исследована теоретическими методами (см. раздел 1.1) и есть с чем сравнивать результаты численных расчетов.

1.2.1. Генерация случайных соленоидальных полей скорости с заданной корреляцией в случае двух пространственных измерений

Предположим, что моделируемая двумерная среда является фрактальной, поэтому на больших расстояниях корреляционная функция случайного поля скоростей $\vec{c}(x, y)$ убывает по степенному закону:

$$K_{ij}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \equiv \langle c_i(\vec{r}_1) c_j(\vec{r}_2) \rangle \propto V^2 \left(\frac{a}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \right)^{2h}, \quad |\vec{r}_1 - \vec{r}_2| \gg a, \quad (1.2.1)$$

где a — размерный множитель; V^2 — характерное значение функции корреляции $K_{ij}(\vec{r}_{12})$ при $|\vec{r}_{12}| < a$; h — масштабный индекс ($0 < h < 1$). Масштабный индекс h таков, что значения $h > 1$ соответствуют классической диффузии, а при $h \ll 1$ процесс переноса близок к адвективному.

Функция корреляции (1.2.1) в импульсном представлении является тензором второго ранга:

$$K_{ij}(\vec{k}) \equiv \langle c_i c_j \rangle_{\vec{k}} = V^2 a^{2h} |\vec{k}|^{2h-2} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right), \quad 0 < h < 1, \quad (1.2.2)$$

где \vec{k} — волновой вектор; δ_{ik} — единичный тензор (символ Кронекера).

В случае классической диффузии (при $h \geq 1$) в выражение для данного тензора следует ввести экспоненциальный множитель:

$$K_{ij}(\vec{k}) \equiv \langle c_i c_j \rangle_{\vec{k}} = \exp\{-k^2 a^2\} V^2 a^{2h} |\vec{k}|^{2h-2} \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2} \right), \quad (1.2.3)$$

$$h \geq 1.$$

В случае $0 < h < 1$ этот множитель оказывается несущественным.

При расчетах примем значение $V^2 = 1$, величину множителя a будем полагать порядка нескольких шагов расчетной сетки по пространству: $a \sim (h_x - 4h_x) \sim (h_y - 4h_y)$.

Введем скаляр ω , который является z -компонентой трехмерного вектора $\vec{\omega} = (0, 0, \omega)$. Искомое соленоидальное поле скоростей $\vec{c}(x, y)$ представим как

$$\vec{c}(x, y) = \text{rot } \vec{\omega} = \vec{i} \frac{\partial \omega}{\partial y} - \vec{j} \frac{\partial \omega}{\partial x}, \quad (1.2.4)$$

где \vec{i} и \vec{j} — единичные векторы вдоль осей x и y соответственно.

В импульсном представлении

$$c_x(\vec{k}) = ik_y \omega(\vec{k}), \quad c_y(\vec{k}) = -ik_x \omega(\vec{k}). \quad (1.2.5)$$

Из уравнения (1.2.2) следует, что

$$\begin{aligned} K_{xx}(\vec{k}) &= V^2 a^{2h} k_y^2 |\vec{k}|^{2h-4} = k_y^2 L(\vec{k}), \\ K_{yy}(\vec{k}) &= V^2 a^{2h} k_x^2 |\vec{k}|^{2h-4} = k_x^2 L(\vec{k}), \\ K_{xy}(\vec{k}) &= -V^2 a^{2h} k_x k_y |\vec{k}|^{2h-4} = K_{yx}(\vec{k}) = -k_x k_y L(\vec{k}), \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

где

$$L(\vec{k}) = V^2 a^{2h} |\vec{k}|^{2h-4} = \langle \omega \omega \rangle_{\vec{k}}, \quad 0 < h < 1. \quad (1.2.7)$$

В классическом случае

$$L(\vec{k}) = \exp\{-k^2 a^2\} V^2 a^{2h} |\vec{k}|^{2h-4} = \langle \omega \omega \rangle_{\vec{k}}, \quad h > 1. \quad (1.2.8)$$

Таким образом, уравнения (1.2.7) и (1.2.8) задают функции корреляции для величин ω . Алгоритм построения случайного поля скоростей $\vec{c}(x, y)$ с заданными статистическими свойствами состоит из двух этапов:

- в узлах регулярной расчетной сетки с шагами h_x, h_y вычисляются случайные величины $\omega_{i,j}$, распределенные по нормальному закону с нулевым средним и корреляционной функцией, задаваемой формулами (1.2.7) или (1.2.8) в зависимости от значения параметра h ; используется алгоритм, описанный в [4];
- по найденным $\omega_{i,j}$ численным дифференцированием рассчитывается искомое поле скоростей:

$$c_x^{i,j+1/2} = \frac{\omega_{i,j+1} - \omega_{i,j}}{h_y}, \quad c_y^{i+1/2,j} = -\frac{\omega_{i+1,j} - \omega_{i,j}}{h_x}, \quad (1.2.9)$$

где h_x и h_y — шаги расчетной сетки вдоль осей x и y соответственно.

Продемонстрируем результаты работы приведенного алгоритма генерации случайного поля скоростей при различных параметрах h . Зададим такую расчетную сетку, что $N = 128$, $h_x = h_y$. Множитель $V^2 = 1$, $a = 2h_x = 2h_y$.

Примеры случайных полей промежуточных величин $\omega_{i,j}$ для $h = 0,25$, $0,75$ и $1,5$ представлены на **рис. 1.2.1—1.2.3** в виде поверхностей (для наглядности они имеют неоднородную окраску: чем светлее область на поверхности, тем больше значение величины $\omega_{i,j}$ в этой области). Видно, что с увеличением параметра h случайное поле $\omega_{i,j}$ становится более однородным. Применение формул (1.2.9) приводит к отвечающим этим полям $\omega_{i,j}$ распределениям скоростей $\vec{c}(x, y)$. На **рис. 1.2.4—1.2.6** представлены векторные диаграммы фрагментов полей $\vec{c}(x, y)$ при различных параметрах h .

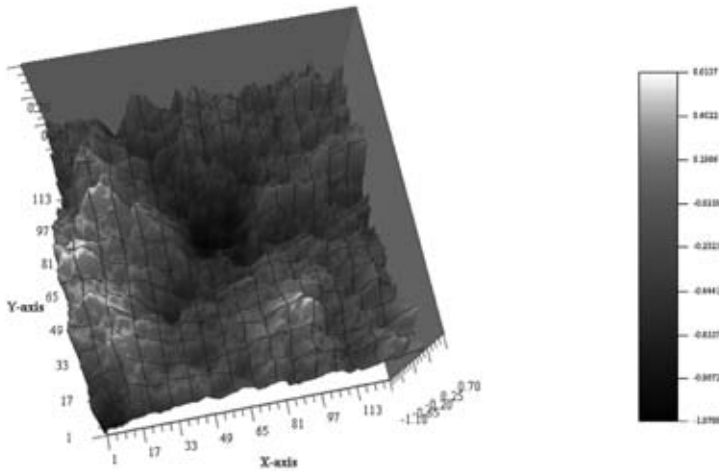


Рис. 1.2.1. Пример случайного поля величин $\omega_{i,j}$ при $h = 0,25$, $N = 128$,
 $a = 2h_x = 2h_y$

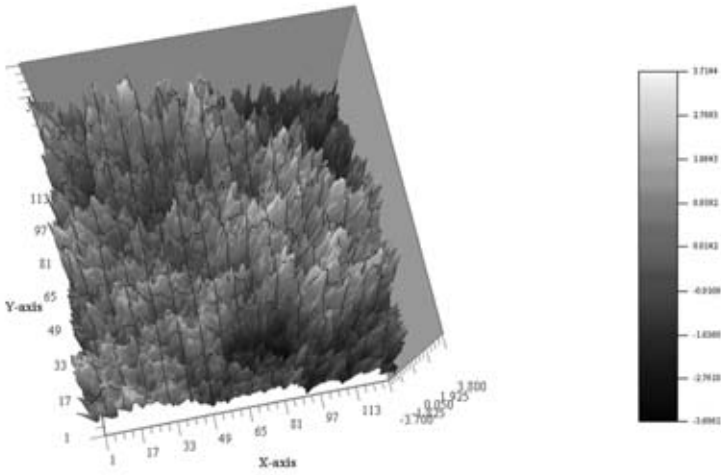


Рис. 1.2.2. Пример случайного поля величин $\omega_{i,j}$ при $h = 0,75$, $N = 128$,
 $a = 2h_x = 2h_y$

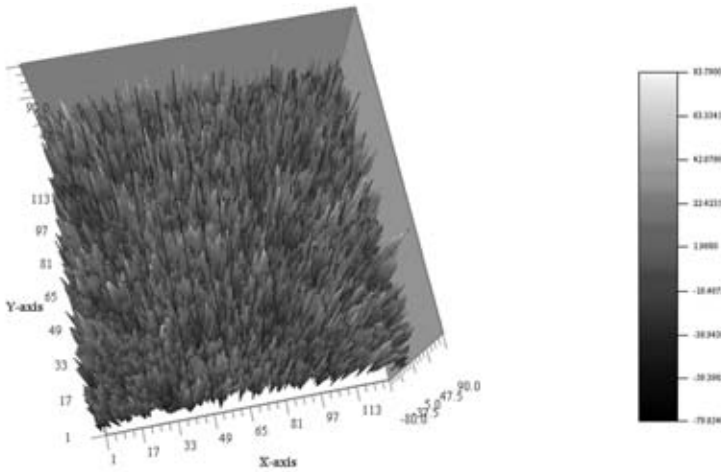


Рис. 1.2.3. Пример случайного поля величин $\omega_{i,j}$ при $h = 1,5$, $N = 128$,
 $a = 2h_x = 2h_y$

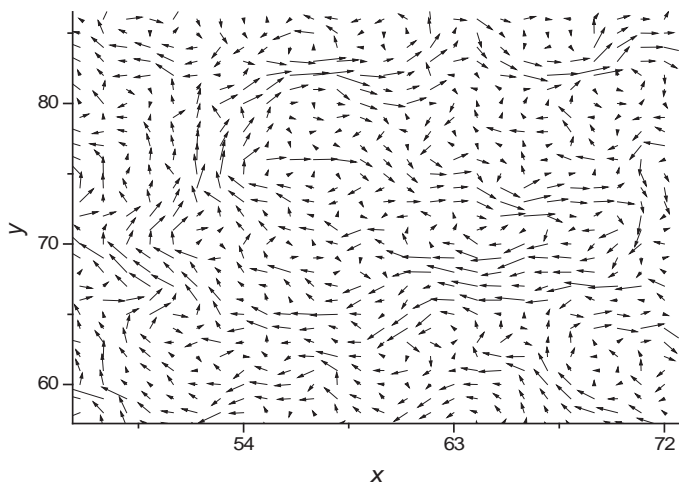


Рис. 1.2.4. Пример случайного поля скоростей $\vec{c}(x, y)$ при $h = 0,25$, $N = 128$, $a = 2h_x = 2h_y$ (фрагмент изображения)

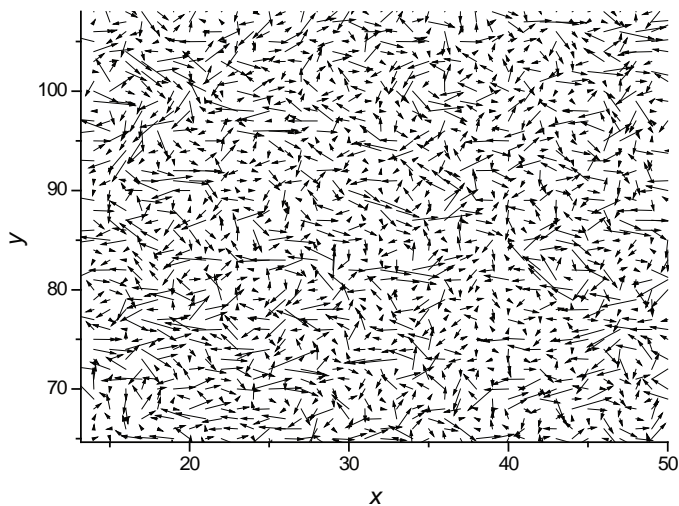


Рис. 1.2.5. Пример случайного поля скоростей $\vec{c}(x, y)$ при $h = 0,75$, $N = 128$, $a = 2h_x = 2h_y$ (фрагмент изображения)

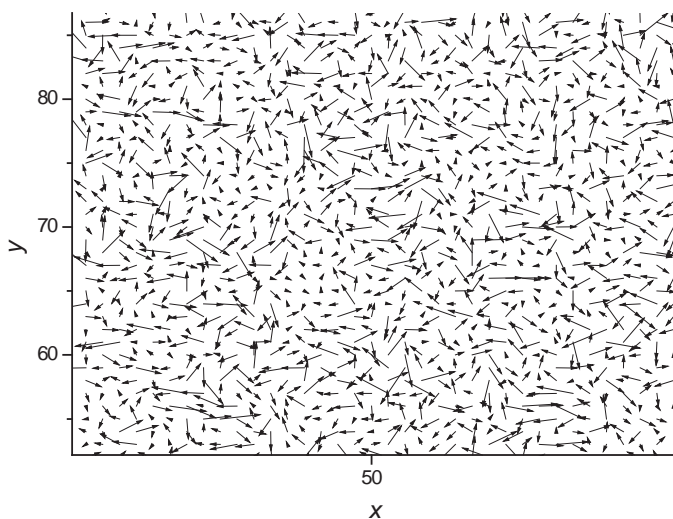


Рис. 1.2.6. Пример случайного поля скоростей $\vec{c}(x, y)$ при $h = 1,5$, $N = 128$,
 $a = 2h_x = 2h_y$ (фрагмент изображения)

При $h = 0,25$ (см. **рис. 1.2.4**) четко прослеживаются длинные области (каналы) с примерно одинаковыми или плавно меняющимися направлениями векторов скорости. При $h = 0,75$ (см. **рис. 1.2.5**) такие каналы видны менее четко, а в случае классической диффузии (см. **рис. 1.2.6**), при $h = 1,5 > 1$, практически невозможно визуально выделить области со скоррелированными направлениями векторов скоростей.

1.2.2. Алгоритм численного решения двумерного уравнения конвективного переноса

Постановка и дискретизация задачи. Рассмотрим систему уравнений конвективного переноса в двумерном случае с дивергентным полем скоростей:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} + \frac{\partial v \varphi}{\partial y} = 0, \quad \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} = 0, \quad u = c_x(x, y), \quad v = c_y(x, y), \quad (1.2.10)$$

$$(x, y) \in D: \{[0 \leq x \leq L] \times [0 \leq y \leq L]\}, \quad t \in [0, T],$$

где $\varphi = \varphi(x, y, t)$ характеризует концентрацию переносимой субстанции; c_x и c_y — скорости конвективного переноса вдоль направлений x и y соответственно; L — размер расчетной области; T — конечное время.

Для прямого численного моделирования процесса стохастической адвекции (конвекции) необходимо использовать алгоритмы численного решения уравнения (1.2.10), обладающие минимальной сеточной диффузией и улучшенными дисперсионными свойствами.

Покроем область $D: \{[0 \leq x \leq L] \times [0 \leq y \leq L]\}$ равномерной расчетной сеткой с шагами $h_x = h_y = L/(M-1)$, где M — число узлов по каждому из направлений, и будем относить концентрации примеси и конвективные скорости к серединам граней расчетных ячеек. Обозначим их как $\Phi_{i+1/2,j}^n$, $\Phi_{i,j+1/2}^n$, $v_{i+1/2,j}^n$, $u_{i,j+1/2}^n$, где верхний индекс n указывает на номер временного слоя $t_n = t_{n-1} + \tau_n$, $t_0 = 0$, $\tau_n > 0$ — переменный шаг по времени. Кроме того, введем так называемую консервативную переменную концентрации, которую будем относить к серединам расчетных пространственно-временных ячеек и обозначать $\Psi_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}$. Величины $\Phi_{i+1/2,j}^n$, $\Phi_{i,j+1/2}^n$ в дальнейшем будем называть потоковыми переменными.

Вычисление новых значений консервативных переменных. В качестве начальных условий в момент времени $t_0 = 0$ зададим значения консервативных переменных $\Psi_{i+1/2,j+1/2}^0 = W_{i+1/2,j+1/2}$ как первичные. Величины потоковых переменных $\Phi_{i+1/2,j}^0$, $\Phi_{i,j+1/2}^0$ при $t_0 = 0$ будем считать вторичными и зададим их следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_{i,j+1/2}^0 &= \begin{cases} \Psi_{i+1/2,j+1/2}^0, & \text{если } u_{i,j+1/2} \leq 0, \\ \Psi_{i-1/2,j+1/2}^0, & \text{если } u_{i,j+1/2} > 0, \end{cases} \\ \Phi_{i+1/2,j}^0 &= \begin{cases} \Psi_{i+1/2,j+1/2}^0, & \text{если } v_{i+1/2,j} \leq 0, \\ \Psi_{i+1/2,j-1/2}^0, & \text{если } v_{i+1/2,j} > 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

На первом шаге по времени аппроксимируем уравнение баланса (1.2.10) как

$$\begin{aligned} &\frac{\Psi_{i+1/2,j+1/2}^{1/2} - \Psi_{i+1/2,j+1/2}^0}{\tau_1/2} + \frac{(u\Phi)_{i+1,j+1/2}^0 - (u\Phi)_{i,j+1/2}^0}{h_x} + \\ &+ \frac{(v\Phi)_{i+1/2,j+1}^0 - (v\Phi)_{i+1/2,j}^0}{h_y} = 0. \end{aligned} \quad (1.2.12)$$

На последующих временных шагах дискретное уравнение баланса будет иметь вид

$$\begin{aligned} & \frac{\Psi_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} - \Psi_{i+1/2, j+1/2}^{n-1/2}}{(\tau_n + \tau_{n-1})/2} + \frac{(u\varphi)_{i+1, j+1/2}^n - (u\varphi)_{i, j+1/2}^n}{h_x} + \\ & + \frac{(v\varphi)_{i+1/2, j+1}^n - (v\varphi)_{i+1/2, j}^n}{h_y} = 0. \end{aligned} \quad (1.2.13)$$

Нетрудно видеть, что схема (1.2.13) на гладких решениях аппроксимирует исходное уравнение со вторым порядком аппроксимации по пространственным переменным и первым порядком по времени. В случае постоянства временных шагов будет обеспечен и второй порядок аппроксимации по времени.

Коррекция консервативных переменных. Уравнение адвекции (1.2.10) на соленоидальном поле скоростей можно представить в характеристическом виде:

$$\frac{\partial\varphi}{\partial t} + u \frac{\partial\varphi}{\partial x} + v \frac{\partial\varphi}{\partial y} = 0, \quad (1.2.14)$$

откуда непосредственно следует, что при переносе по характеристикам значение концентрации остается постоянным, т. е. внутри области новые локальные минимумы или максимумы образовываться не могут. Это часто называют принципом максимума.

При вычислениях новых консервативных переменных в соответствии с (1.2.12) и (1.2.13) их значения могут оказаться больше или меньше всех окружающих расчетную ячейку потоковых переменных, что приведет к нарушению принципа максимума и появлению немонотонности в численном решении. Чтобы численное решение оставалось монотонным, применим процедуру нелинейной коррекции, заключающуюся в следующем.

Вычислим максимальные и минимальные значения потоковых переменных по расчетной ячейке:

$$\begin{aligned} (\min \varphi)_{i+1/2, j+1/2}^n &= \min \{ \varphi_{i, j+1/2}^n, \varphi_{i+1, j+1/2}^n, \varphi_{i+1/2, j}^n, \varphi_{i+1/2, j+1}^n \}, \\ (\max \varphi)_{i+1/2, j+1/2}^n &= \max \{ \varphi_{i, j+1/2}^n, \varphi_{i+1, j+1/2}^n, \varphi_{i+1/2, j}^n, \varphi_{i+1/2, j+1}^n \}. \end{aligned} \quad (1.2.15)$$

Будем считать консервативные величины, вычисленные по формулам (1.2.12) и (1.2.13), предварительными и обозначать их $\tilde{\Psi}_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2}$.

Рассчитаем величину дисбаланса $D_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2}$ в ячейке, образующегося за счет нарушения принципа максимума:

$$D_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} = \begin{cases} 0, & \text{если } (\min\varphi)_{i+1/2, j+1/2}^n \leq \Psi_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} \leq (\max\varphi)_{i+1/2, j+1/2}^n, \\ \Psi_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} - (\max\varphi)_{i+1/2, j+1/2}^n, & \text{если } \Psi_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} > (\max\varphi)_{i+1/2, j+1/2}^n, \\ \Psi_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} - (\min\varphi)_{i+1/2, j+1/2}^n, & \text{если } \Psi_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} < (\min\varphi)_{i+1/2, j+1/2}^n. \end{cases} \quad (1.2.16)$$

Для сохранения монотонности решения при соблюдении принципа консервативности количество переносимой субстанции, равное $D_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} h_x h_y$, должно быть переправлено в соседние расчетные ячейки посредством корректировки выходящих из данной ячейки потоков.

Суммарный выходящий поток

$$S_{\text{out}} = \sum_k u_k \varphi_k h_y + \sum_m v_m \varphi_m h_x, \quad (1.2.17)$$

где локальные индексы k, m фиксируют грани, через которые переносимая субстанция покидает данную ячейку. Будем считать, что суммарный дополнительный поток H , восстанавливающий монотонность решения в ячейке, прямо пропорционален каждому из исходных исходящих потоков, т. е.

$$H = \left\{ \sum_k H_k h_y + \sum_m H_m h_x \right\} = \lambda \left\{ \sum_k u_k \varphi_k h_y + \sum_m v_m \varphi_m h_x \right\}, \quad (1.2.18)$$

$$\lambda = \frac{D_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} h_x h_y}{\sum_k u_k \varphi_k h_y + \sum_m v_m \varphi_m h_x}.$$

Окончательные значения консервативных переменных рассчитываются с учетом этих дополнительных потоков:

$$\Psi_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} = \tilde{\Psi}_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2} - \frac{H_{i+1, j+1/2} - H_{i, j+1/2}}{h_x} - \frac{H_{i+1/2, j+1} - H_{i+1/2, j/2}}{h_y}. \quad (1.2.19)$$

Вычисление новых значений потоковых переменных. Для замыкания уравнений (1.12) и (1.13) необходимо определить значения потоковых

переменных на последующем временном слое. Для этого воспользуемся методом характеристик с расщеплением по пространственным переменным.

Перепишем исходное дифференциальное уравнение в виде

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} + \frac{\partial u \varphi}{\partial x} = q_x, \quad q_x = -\frac{\partial v \varphi}{\partial y}. \quad (1.2.20)$$

В областях, где скорость u не обращается в нуль, преобразуем (1.2.20) к виду

$$\frac{\partial g}{\partial t} + u \frac{\partial g}{\partial x} = -u q_x, \quad q_x = \frac{\partial v \varphi}{\partial y}, \quad g = u \varphi \quad (1.2.21)$$

и вычислим новые значения потоковых переменных $\varphi_{i,j+1/2}^{n+1}$ по неоднородной схеме «Кабаре» на переменном поле скоростей [5].

Вначале определяются предварительные значения новых конвективных потоков $\bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1/2}$:

$$\bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1} = \begin{cases} 2G_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - (\tilde{g}_{i+1,j+1/2}^n)_R, & \text{если } (u_{i,j+1/2} \leq 0) \text{ и } (u_{i+1,j+1/2} \leq 0), \\ 2G_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2} - (\tilde{g}_{i-1,j+1/2}^n)_L, & \text{если } (u_{i,j+1/2} > 0) \text{ и } (u_{i-1,j+1/2} > 0), \\ \frac{2|r_x| G_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} + (1-|r_x|)(\tilde{g}_{i,j+1/2}^n)_L}{1-|r_x|}, & \text{если } (u_{i,j+1/2} \leq 0) \text{ и } (u_{i+1,j+1/2} > 0), \\ \frac{2|r_x| G_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2} + (1-|r_x|)(\tilde{g}_{i,j+1/2}^n)_R}{1-|r_x|}, & \text{если } (u_{i,j+1/2} > 0) \text{ и } (u_{i-1,j+1/2} \leq 0), \end{cases} \quad (1.2.22)$$

где

$$\begin{aligned} (\tilde{g}_{i,j+1/2}^n)_L &= g_{i,j+1/2}^n - \tau_n \frac{(u_{i+1,j+1/2} + u_{i,j+1/2})}{2} (q_x)_{i+1/2,j+1/2}^n, \\ (\tilde{g}_{i,j+1/2}^n)_R &= g_{i,j+1/2}^n - \tau_n \frac{(u_{i-1,j+1/2} + u_{i,j+1/2})}{2} (q_x)_{i-1/2,j+1/2}^n, \\ g_{i,j+1/2}^n &= u_{i,j+1/2} \varphi_{i,j+1/2}^n, \quad (q_x)_{i+1/2,j+1/2}^n = \frac{(v\varphi)_{i+1/2,j+1/2}^n - (v\varphi)_{i-1/2,j+1/2}^n}{h_y}, \\ G_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} &= \frac{(u_{i,j+1/2} + u_{i+1,j+1/2})}{2} \Psi_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \quad |r_x| = \left| \frac{u_{i,j+1/2} \tau_n}{h_x} \right|. \end{aligned} \quad (1.2.23)$$

Затем осуществляется коррекция потоков.

Если $u_{i,j+1/2} \leq 0$, то

$$g_{i,j+1/2}^{n+1} = \begin{cases} \bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1}, & \text{если } \min g_R \leq \bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1} \leq \max g_R, \\ \min g_R, & \text{если } \bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1} < \min g_R, \\ \max g_R, & \text{если } \bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1} > \max g_R, \end{cases} \quad (1.2.24)$$

где

$$\begin{aligned} \min g_R &= \min \left\{ G_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \left(\tilde{g}_{i,j+1/2}^n \right)_L \right\}, \\ \max g_R &= \max \left\{ G_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \left(\tilde{g}_{i,j+1/2}^n \right)_L \right\}. \end{aligned} \quad (1.2.25)$$

При $u_{i,j+1/2} > 0$ получаем

$$g_{i,j+1/2}^{n+1} = \begin{cases} \bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1}, & \text{если } \min g_L \leq \bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1} \leq \max g_L, \\ \min g_L, & \text{если } \bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1} < \min g_L, \\ \max g_L, & \text{если } \bar{g}_{i,j+1/2}^{n+1} > \max g_L, \end{cases} \quad (1.2.26)$$

где

$$\begin{aligned} \min g_L &= \min \left\{ G_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \left(\tilde{g}_{i,j+1/2}^n \right)_R \right\}, \\ \max g_L &= \max \left\{ G_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \left(\tilde{g}_{i,j+1/2}^n \right)_R \right\}. \end{aligned} \quad (1.2.27)$$

Значение потоковой переменной на новом временном слое вычисляется как

$$\Phi_{i,j+1/2}^{n+1} = \frac{g_{i,j+1/2}^{n+1}}{u_{i,j+1/2}}. \quad (1.2.28)$$

Для нахождения новых значений потоковых переменных на гранях расчетных ячеек, ортогональных оси Y , исходное дифференциальное уравнение по аналогии с (1.2.21) запишем как

$$\frac{\partial f}{\partial t} + v \frac{\partial f}{\partial x} = -vq_y, \quad q_y = \frac{\partial u \Phi}{\partial x}, \quad f = v\varphi. \quad (1.2.29)$$

Предварительные значения новых конвективных потоков $\bar{f}_{i,j+1/2}^{n+1/2}$ в соответствии с идеологией техники «Кабаре» определим по формулам, аналогичным (1.2.22):

$$\bar{f}_{i+1/2,j}^{n+1} = \begin{cases} 2F_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - (\tilde{f}_{i+1/2,j+1}^n)_U, \\ \text{если } (v_{i+1/2,j} \leq 0) \text{ и } (v_{i+1/2,j+1} \leq 0), \\ 2F_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2} - (\tilde{f}_{i+1/2,j-1}^n)_D, \\ \text{если } (v_{i+1/2,j} > 0) \text{ и } (v_{i+1/2,j-1} > 0), \\ \frac{2|r_y| F_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} + (1-|r_y|)(\tilde{f}_{i+1/2,j}^n)_U}{1-|r_y|}, \\ \text{если } (v_{i+1/2,j} \leq 0) \text{ и } (v_{i+1/2,j+1} > 0), \\ \frac{2|r_y| F_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2} + (1-|r_y|)(\tilde{f}_{i+1/2,j}^n)_D}{1-|r_y|}, \\ \text{если } (v_{i+1/2,j} > 0) \text{ и } (v_{i+1/2,j-1} \leq 0), \end{cases} \quad (1.2.30)$$

где

$$\begin{aligned} (\tilde{f}_{i+1/2,j}^n)_D &= f_{i+1/2,j}^n - \tau_n \frac{(v_{i+1/2,j+1} + v_{i+1/2,j})}{2} (q_y)_{i+1/2,j+1/2}^n, \\ (\tilde{f}_{i+1/2,j}^n)_U &= f_{i+1/2,j}^n - \tau_n \frac{(v_{i+1/2,j} + v_{i+1/2,j-1})}{2} (q_y)_{i+1/2,j-1/2}^n, \\ f_{i+1/2,j}^n &= v_{i+1/2,j} \Phi_{i+1/2,j}^n, \quad (q_y)_{i+1/2,j+1/2}^n = \frac{(u\Phi)_{i+1,j+1/2}^n - (u\Phi)_{i,j+1/2}^n}{h_x}, \\ F_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} &= \frac{(v_{i+1/2,j+1} + v_{i+1/2,j})}{2} v_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \quad |r_y| = \left| \frac{v_{i+1/2,j} \tau_n}{h_y} \right|. \end{aligned} \quad (1.2.31)$$

Коррекция потоков в направлении оси Y осуществляется аналогично (1.2.24)—(1.2.27). Окончательное значение соответствующей потоковой переменной вычисляется как

$$\Phi_{i+1/2,j}^{n+1} = \frac{f_{i+1/2,j}^{n+1}}{v_{i+1/2,j}}. \quad (1.2.32)$$

Таким образом, все переменные, необходимые для перехода к следующему временному слою, полностью определены.

Представленный двумерный алгоритм является обобщением одномерного алгоритма «Кабаре» [5], и в дальнейшем мы будем ссылаться на него под этим именем.

Схема «Кабаре», как она здесь представлена, включает процедуры нелинейной коррекции консервативных и потоковых переменных. Эти процедуры делают схему «Кабаре» монотонной в областях сильных градиентов и не нарушают второго порядка аппроксимации в областях гладкости. Схема является явной и условно устойчивой при $|r_x| \leq 1, |r_y| \leq 1$. Можно показать, что в схеме «Кабаре» аппроксимационная диффузия является наименьшей из всех возможных.

Тестирование алгоритма. Проиллюстрируем свойства описанного алгоритма при решении одномерной задачи конвективного переноса. Для этого зададим поле скоростей $\vec{c}(x, y)$ так, чтобы перенос осуществлялся вдоль одной из координатных осей: $c_x(x, y) \equiv 0, c_y(x, y) \equiv 1$. В этом случае начальное распределение будет двигаться вдоль оси y в положительном направлении. Начальный профиль $\Psi_{i+1/2, j+1/2}^{(0)}$ зададим в виде «ступеньки», расположенной на середине расчетной области:

$$\Psi_{i+1/2, j+1/2}^{(0)} = \begin{cases} 1, & \text{если } n_1 \leq j \leq n_2, \quad n_1, n_2 \in [0, L_y], \\ 0, & \text{если } j \notin [n_1, n_2]. \end{cases} \quad (1.2.33)$$

Двумерная схема «Кабаре» приводит к результатам, показанным на **рис. 1.2.7**.

При решении подобных задач алгоритм коррекции потоковых переменных очень эффективен и приводит к гладкому решению. Введение коррекции консервативных величин решает проблему отрицательных концентраций, возникающих при использовании схемы «Кабаре» без коррекции.

При тестовых расчетах задавались и положительные, и отрицательные значения скоростей c_x, c_y , перенос осуществлялся как вдоль оси x , так и вдоль оси y .

Свойства схемы «Кабаре» на двумерных полях скоростей проиллюстрируем решением задачи на равномерное вращение. Поле скоростей здесь соответствует вращению плоскости относительно начала координат с постоянной угловой скоростью:

$$\begin{cases} c_x(x, y) = r\omega \cos \theta, \\ c_y(x, y) = -r\omega \sin \theta, \\ r = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}, \\ \theta = \arctan \frac{y - y_0}{x - x_0}, \end{cases} \quad (1.2.34)$$

где ω — угловая скорость вращения по часовой стрелке; x_0 и y_0 — координаты центра вращения.

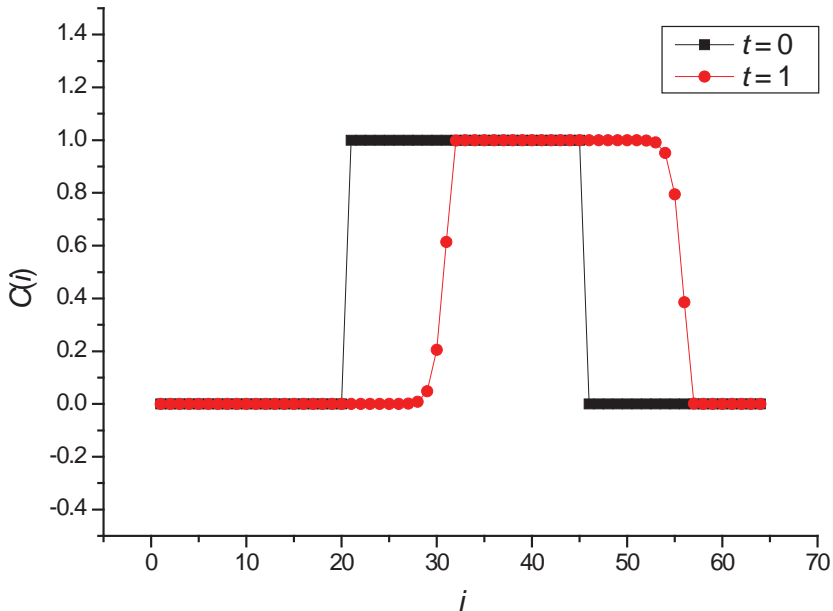


Рис. 1.2.7. Исходный профиль ($t = 0$) и решение, полученное методом «Кабаре»

Поместив центр вращения в середину расчетной области (**рис. 1.2.8**), зададим в качестве начального распределения достаточно гладкую поверхность, например гауссиан (или так называемую шапочку), и поместим ее на некотором расстоянии от центра, чтобы заданная фигура могла беспрепятственно вращаться вокруг центра вращения (**рис. 1.2.9**).

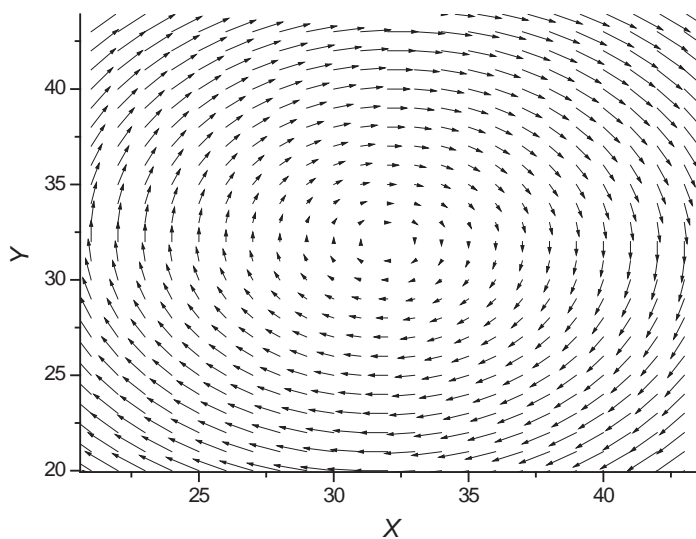


Рис. 1.2.8. Фрагмент кольцевого поля скоростей

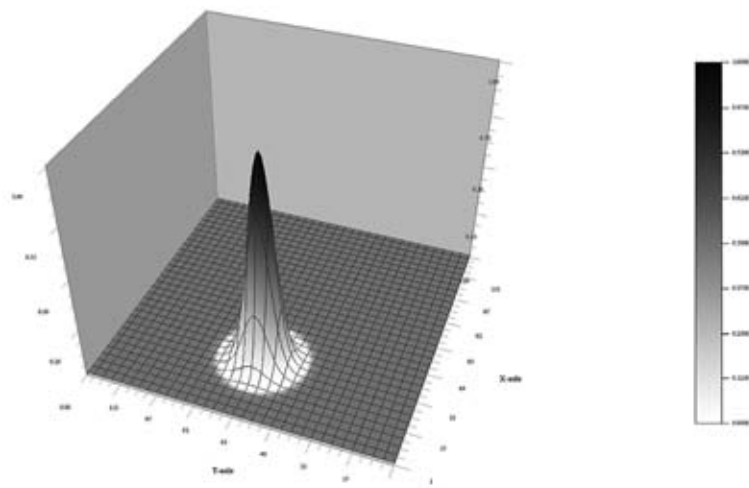


Рис. 1.2.9. Начальное распределение при проведении теста на равномерное вращение

Результат одного проворота (на угол 2π) представлен на **рис. 1.2.10**. При этом использовалась схема «Кабаре» без коррекции консервативных величин. Вращаемая фигура расплывается, появляются области с отрицательными значениями концентрации.

Применение в схеме «Кабаре» алгоритмов коррекции как «виртуальных» потоков, так и консервативных величин приводит к результату, показанному на **рис. 1.2.11**.

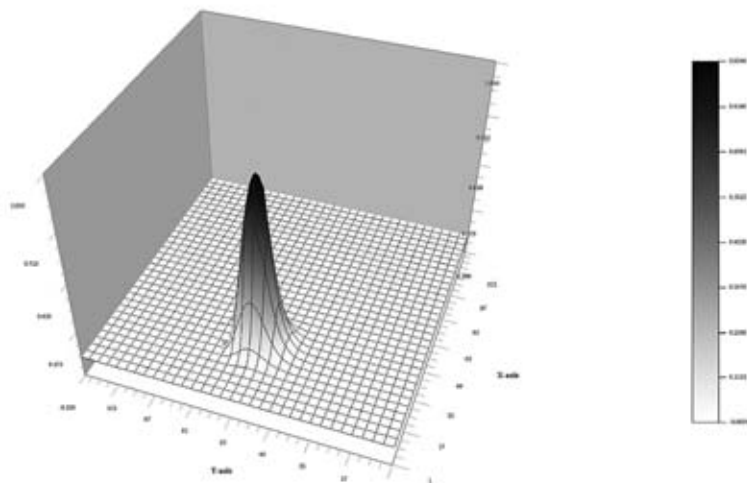


Рис. 1.2.10. Результат одного поворота (схема «Кабаре» с коррекцией «виртуальных» потоков)

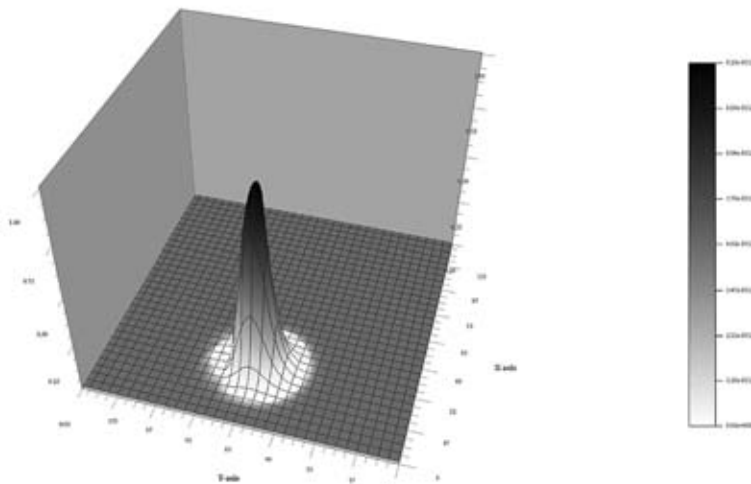


Рис. 1.2.11. Результат одного поворота (схема «Кабаре» с коррекцией как «виртуальных» потоков, так и консервативных величин)

Вращаемая фигура слегка деформируется, однако областей с отрицательными значениями концентрации нет, максимум исходного гауссиана уменьшился с 1 до 0,925.

Как показало тестирование модернизированного алгоритма «Кабаре» на различных модельных задачах, этот алгоритм адекватно описывает перенос вещества, корректно запрограммирован и пригоден для решения задач переноса на смоделированных ранее случайных полях скоростей.

1.2.3. Задача о стохастической адвекции примеси

На двумерных случайных полях скоростей с описанными выше статистическими свойствами будем решать прямую задачу конвективного переноса методом «Кабаре». Для предварительных вычислений возьмем расчетную сетку 256×256 точек, пространственные шаги сетки h_x и h_y подберем так, чтобы размеры расчетной области составляли 1 по каждому из направлений, шаг по времени $\tau = 0,4 \frac{h}{\max\{c_{i,j}\}}$. В дальнейшем расчетную

сетку увеличим до 512×512 узлов, соответственно размеры области станут 2×2 .

Начальное распределение переносимого вещества зададим на нулевом временном слое в виде единичного возмущения, расположенного в центре расчетной области, как показано на **рис. 1.2.12** (закрашенные области — ячейки с единичной концентрацией, не закрашенные — с нулевой):

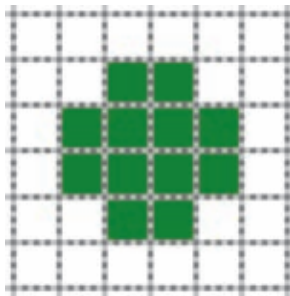


Рис. 1.2.12. Начальное распределение переносимой субстанции в центре расчетной области

На границах расчетной области выполняется условие равенства нулю потоков переносимого вещества. Таким образом, суммарная концентрация на расчетном поле остается постоянной и согласно начальному условию (см. **рис. 1.2.12**) составляет 12.

Случайные поля скоростей. Рассмотрим, например, случайное поле скоростей при $a = 2h_x = 2h_y$, $N = 256$ и $h = 0,25$. Фрагмент одного из таких полей приведен на **рис. 1.2.13**.

На **рис. 1.2.14** и **1.2.15** для примера представлены два решения задачи о стохастической адвекции на полученном случайном поле для двух различных моментов времени: $t_1 = 0,03565$ (200 итераций) и $t_2 = 0,07130$ (400 итераций). На этих рисунках значения концентраций в закрашенных темно-серым цветом областях составляют порядка 10^{-6} — 10^{-8} .

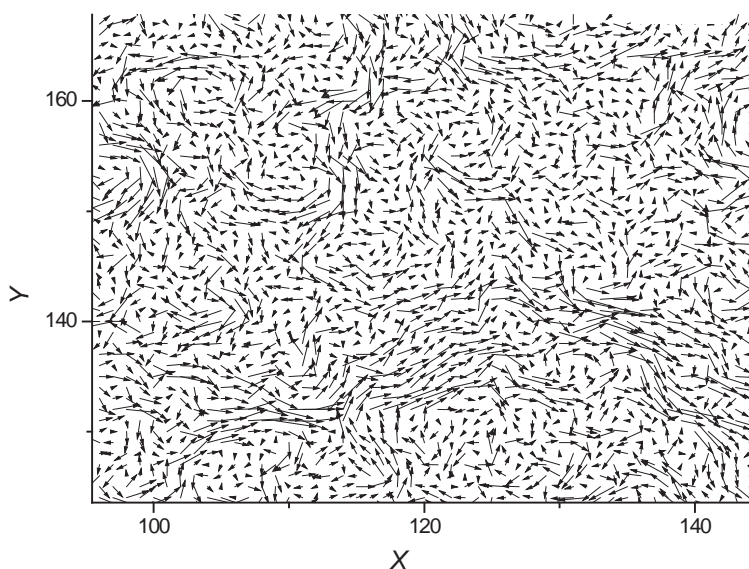


Рис. 1.2.13. Фрагмент случайного поля скоростей при $a = 2h_x = 2h_y$,
 $N = 256$ и $h = 0,25$

Рассмотрим случай $h = 1,5$, который должен соответствовать классической диффузии. Фрагмент случайного поля для $h = 1,5$ приведен на **рис. 1.2.16**. В отличие от аналогичного векторного поля для $h = 0,25$ (см. **рис. 1.2.13**) на этом поле четкие каналы с примерно одинаковыми или плавно меняющимися направлениями скоростей трудноразличимы.

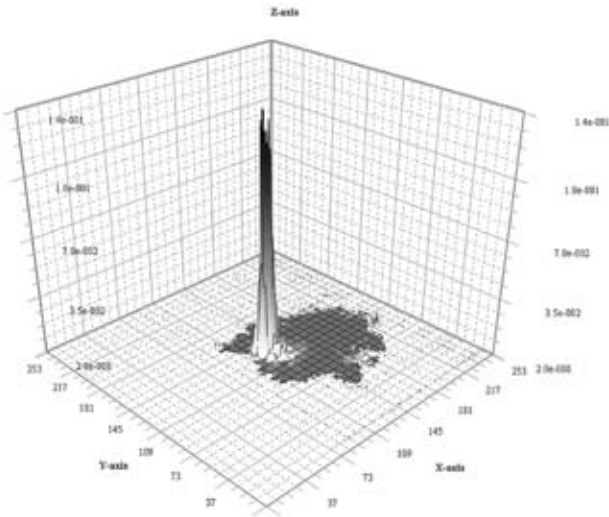


Рис. 1.2.14. Пример решения задачи стохастической адвекции при $h = 0,25$ для момента времени $t_1 = 0,03565$ (200 итераций)

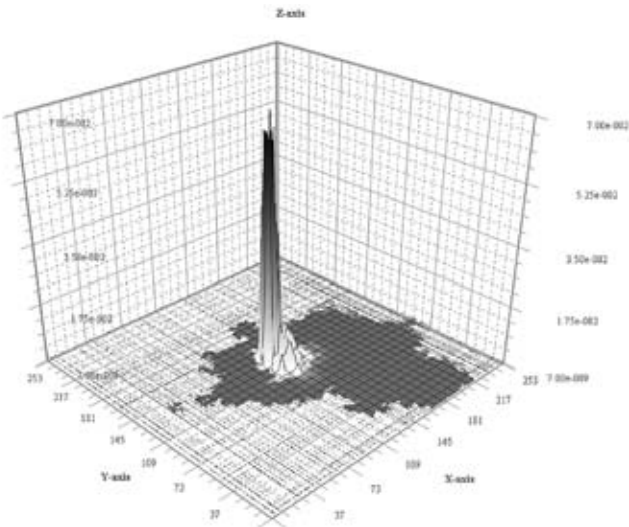


Рис. 1.2.15. Пример решения задачи стохастической адвекции при $h = 0,25$ для момента времени $t = 0,07130$ (400 итераций)

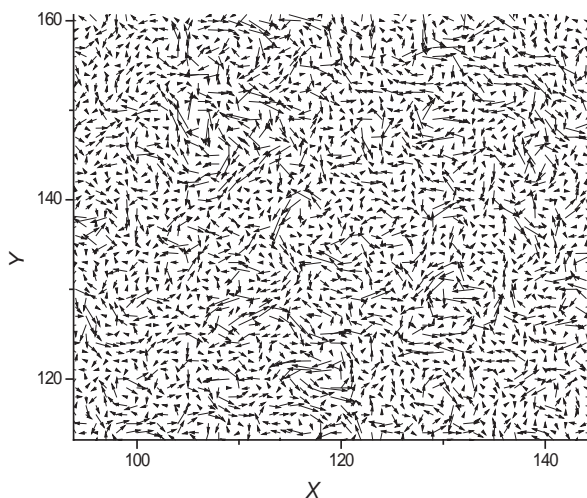


Рис. 1.2.16. Фрагмент случайного поля скоростей при $a = 2h_x = 2h_y$,
 $N = 256$ и $h = 1,5$

Решение задачи конвективного переноса примеси на данном поле в один из моментов времени приведено на рис. 1.2.17. Далеких выбросов концентрации на этом рисунке нет (ср. с распределениями на рис. 1.2.14 и 1.2.15).

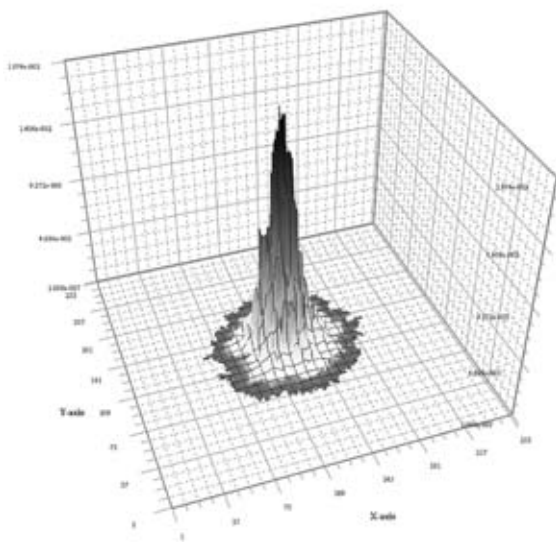


Рис. 1.2.17. Пример решения задачи стохастической адвекции при $h = 1,5$

Для каждой из двух пространственных компонент скоростей можно построить функцию распределения $F(x) = P(c_{i,j}^{(n)} < x)$, где $P(\cdot)$ — вероятность, $c_{i,j}^{(n)}$ — значение скорости (c_x или c_y) в узле (i, j) для n -й реализации случайного поля. На **рис. 1.2.18** представлены семь функций распределения, построенных для семи различных значений параметра h . Для $h > 1$, т. е. в случае классической диффузии, функции распределения практически совпадают.

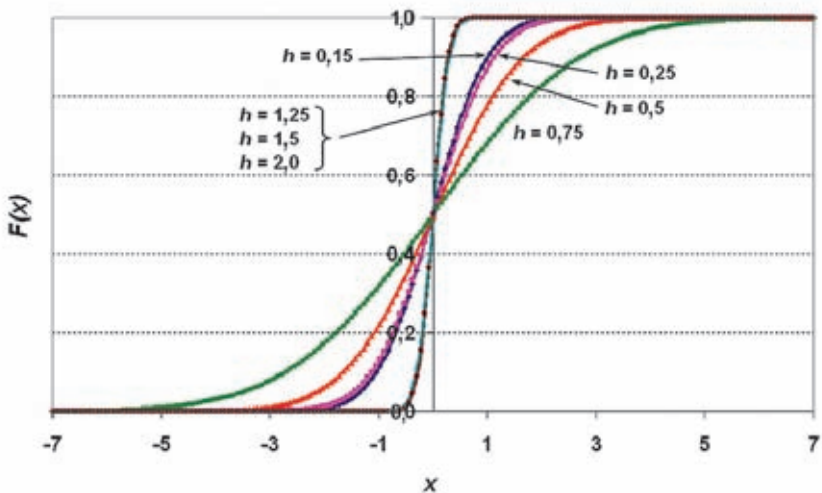


Рис. 1.2.18. Функции распределения одной из компонент случайных полей скоростей при различных значениях h

При увеличении индекса h от 0 до 1 дисперсии растут. Однако в случае классической диффузии ($h > 1$) дисперсия относительно мала и практически не зависит от h . Таким образом, использованный в работе алгоритм построения случайных полей скоростей приводит к разным распределениям скорости. Примеры полей скоростей для h , равных 0,15, 0,25, 0,50 и 0,75, представлены на **рис. 1.2.19**.

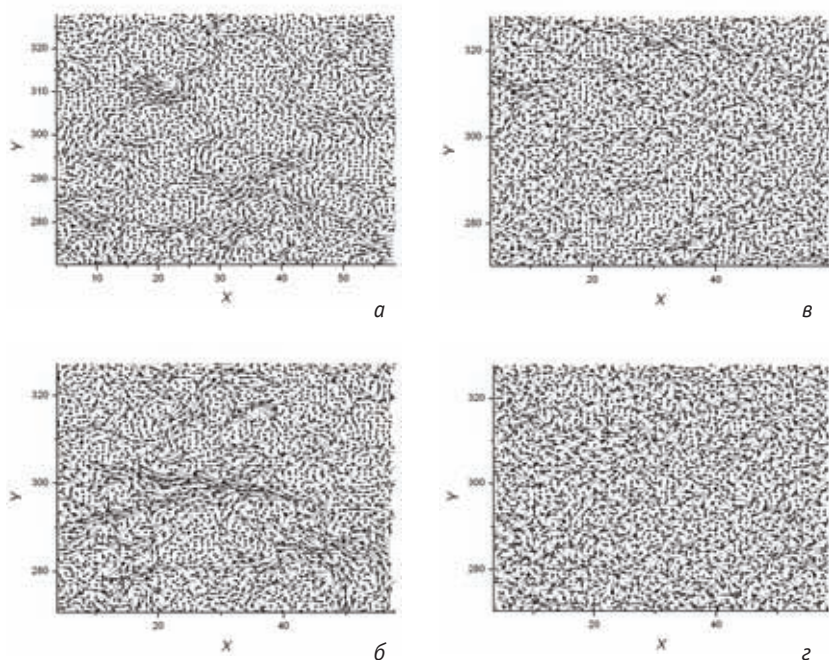


Рис. 1.2.19. Примеры случайных полей скоростей при h , равных 0,15 (а), 0,25 (б), 0,50 (в) и 0,75 (г)

Это фрагменты случайных полей, построенных на сетке 1024×1024 ячеек. При увеличении h характерная структура каналов становится менее различимой. При $h > 1$ поле делается практически нескоррелированным, и каналов нет. Очевидно, что с уменьшением h проводящие свойства данных полей будут усиливаться, что согласуется с теоретическими выводами. Количественное сравнение численных расчетов с теоретическими проведено в следующем разделе.

Распространение примеси с течением времени. Для анализа численных решений задачи о стохастической адвекции рассмотрим сначала графики зависимости среднего квадрата радиуса облака концентрации $\langle r^2 \rangle$ от времени t :

$$\langle r^2 \rangle = \frac{\int d^2r r^2 C(\vec{r}, t)}{\int d^2r C(\vec{r}, t)}, \quad (1.2.35)$$

где C — концентрация.

В случае классической диффузии, как известно, $\langle r^2 \rangle \sim t$, т. е. на графике будет прямая линия. При так называемой супердиффузии облако концентрации растёт быстрее, и график будет загибаться вверх. При субдиффузии облако растёт медленнее, и кривая $\langle r^2 \rangle(t)$ загнется вниз. Согласно теоретическим выкладкам (см. раздел 1.1) в супердиффузионном режиме (при $0 < h < 1$) среднеквадратичный радиус облака примеси с течением времени возрастает по следующему закону:

$$\langle r^2 \rangle \sim (Va^h t)^{2/(1+h)}, \quad (1.2.36)$$

т. е. для $h < 1$ средний радиус

$$\langle r^2 \rangle \sim t^\gamma, \quad \gamma = \frac{2}{1+h} > 1. \quad (1.2.37)$$

При $h > 1$ происходит классическая диффузия, и $\langle r^2 \rangle \sim t$. Случай $h = 1$ является переходным и в данной работе не рассматривается.

Для численных расчетов формула (1.2.35) приобретает вид

$$\langle r^2 \rangle^{(n)} = \frac{\sum_{i,j} \left\{ \left(\frac{N_x}{2} - i \right)^2 h_x^2 + \left(\frac{N_y}{2} - j \right)^2 h_y^2 \right\} C_{i,j}^n}{\sum_{i,j} C_{i,j}^n}, \quad (1.2.38)$$

где N_x и N_y — число узлов расчетной сетки по соответствующим направлениям; $C_{i,j}^n$ — значение концентрации в узле (i, j) на n -м временном слое. Суммирование производится по всем узлам расчетной сетки.

Как показали численные расчеты, графики зависимости $\langle r^2 \rangle$ от n заметно меняются от реализации к реализации случайного поля скоростей. Например, на **рис. 1.2.20** представлены кривые зависимости $\langle r^2 \rangle$ от n , полученные на различных реализациях случайных полей скоростей, но при одном и том же наборе параметров корреляционной функции и расчетной

сетки ($h = 0,25$, $N_x = N_y = 256$ и т. д.). Из-за большого разброса значений $\langle r^2 \rangle$ разумно строить усредненные кривые по многим реализациям и в каждой точке графика численно оценивать дисперсию.

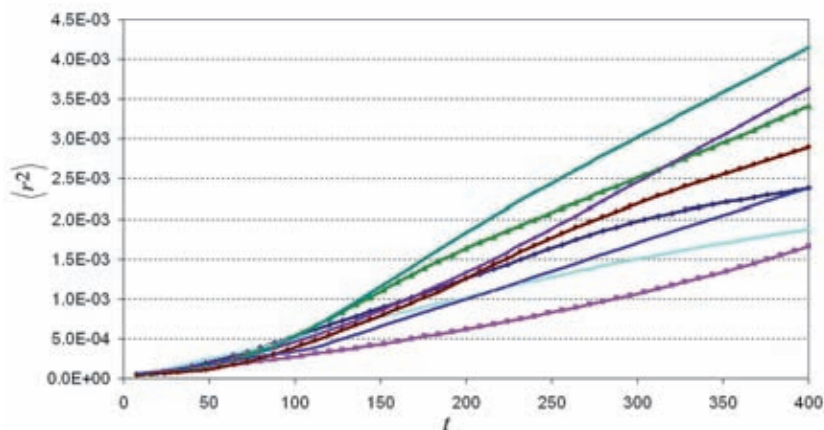


Рис. 1.2.20. Серия кривых зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t , полученных на различных реализациях случайных полей скоростей

Рассмотрим результаты расчетов на сетке 256×256 для h , равных 0,25, 0,75 и 1,5. Для каждого значения параметра h было насчитано 100 реализаций случайных полей скоростей и на них выполнено по 10 000 итераций (шагов по времени) по схеме «Кабаре». После каждых 200 итераций вычислялись средние значения квадратов радиусов облаков примеси. Результаты усреднения найденных радиусов по 100 реализациям и соответствующие дисперсии приведены на **рис. 1.2.21—1.2.23**. Область серого цвета характеризует дисперсию, сплошная прямая линия соединяет две крайние точки графика и служит для наглядной демонстрации того, насколько сильно изогнута линия среднего квадрата радиуса.

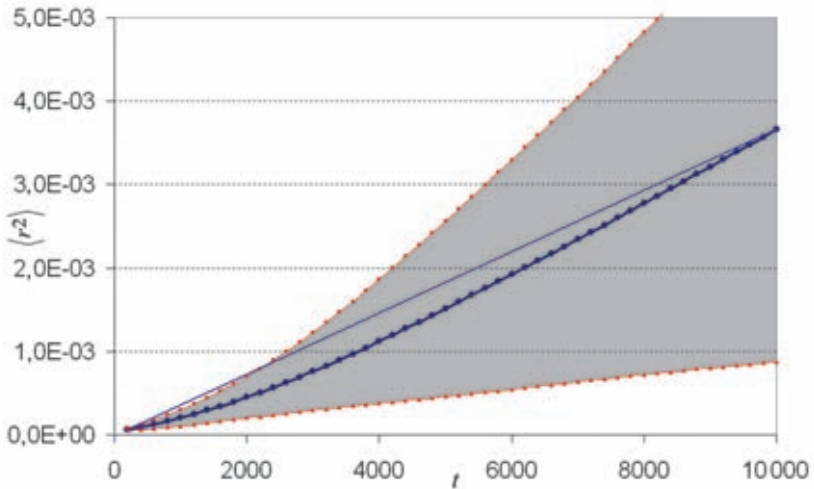


Рис. 1.2.21. Графики зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t . $h = 0,25$, сетка 256×256 , усреднение по 100 реализациям

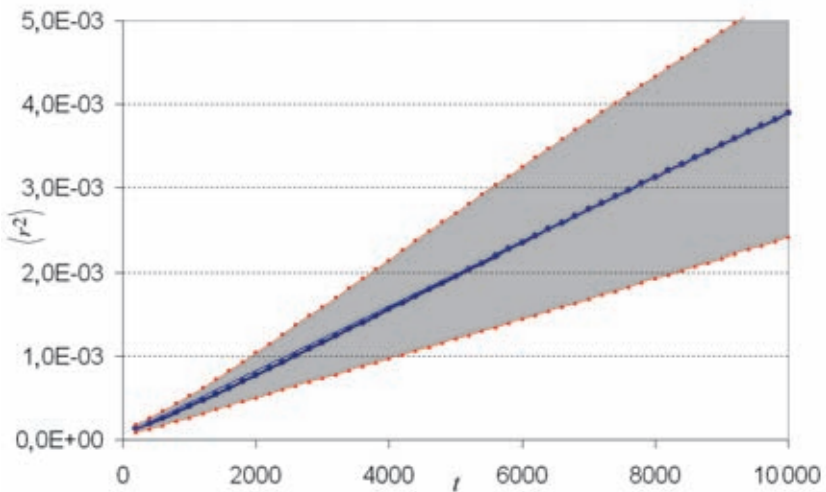


Рис. 1.2.22. Графики зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t . $h = 0,75$, сетка 256×256 , усреднение по 100 реализациям

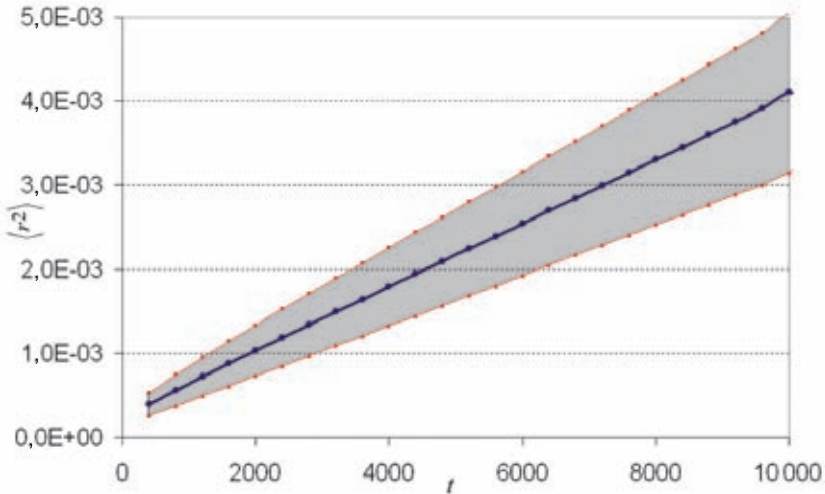


Рис. 1.2.23. Графики зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t . $h = 1,5$, сетка 256×256 , усреднение по 50 реализациям

При $h = 0,25$ на всем временном интервале график $\langle r^2 \rangle$ от t монотонно возрастает без перегибов, характер этого роста быстрее линейного (супердиффузионный режим). Также видна достаточно большая дисперсия при увеличении числа шагов по времени, что объясняется большим разбросом значений $\langle r^2 \rangle$ от реализации к реализации случайного поля скоростей. При $h = 0,75$ график практически не отличается от прямой линии, небольшое расхождение можно заметить только при $t < 4000$. Для $h = 1,5$ график полностью совпадает с прямой (классическая диффузия). Полученные три графика представлены на **рис. 1.2.24** в логарифмическом масштабе.

В логарифмическом масштабе эти графики примерно с 1000-го шага по времени имеют вид прямых линий. Методом наименьших квадратов вычислен наклон этих прямых. Таким образом, получена численная оценка параметра γ в соотношении (1.2.37) для среднего радиуса облака примеси и времени. Теоретическое значение параметра γ согласно (1.2.36) связано с параметром h следующим соотношением:

$$\gamma_{\text{theor}} = \frac{2}{h+1}. \quad (1.2.39)$$

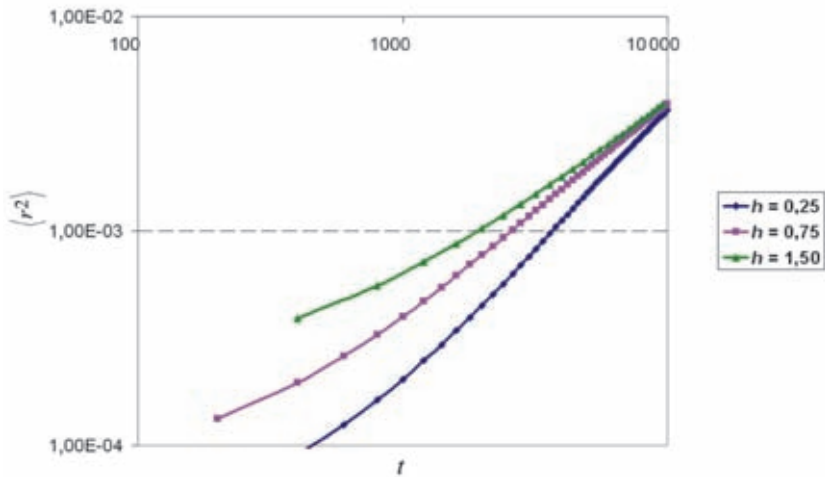


Рис. 1.2.24. Графики зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t в логарифмическом масштабе.
Сетка 256×256

В табл. 1.2.1 сведены значения параметра h корреляционной функции случайной среды, численные и теоретические оценки параметра γ (γ^* и γ_{theor}), а также относительное отклонение $\left\{ \left| \gamma_{\text{theor}} - \gamma^* \right| / \gamma_{\text{theor}} \right\} 100\%$. Отклонение значений параметра γ^* , найденных из численного эксперимента, от теоретических значений γ_{theor} не превышает 20%.

Таблица 1.2.1. Сравнение численных (сетка 256×256 ячеек) и теоретических значений параметра γ

h	γ^*	γ_{theor}	Относительное отклонение, %
0,25	1,31	1,6	18
0,75	1,01	1,1429	12
1,50	0,87	1,0	13

Аналогичные расчеты проведены на более подробной сетке — 512×512 (рис. 1.2.25—1.2.28). Для сравнения добавлен промежуточный случай $h = 0,5$. В логарифмическом масштабе эти четыре графика выглядят так, как показано на рис. 1.2.29.

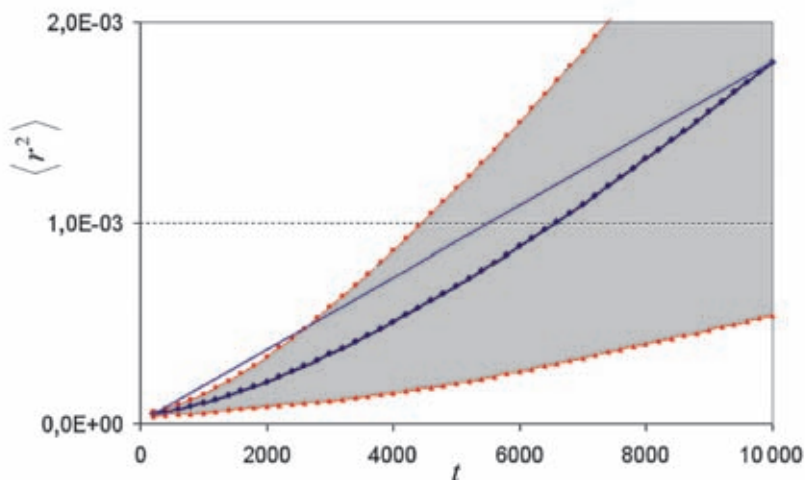


Рис. 1.2.25. График зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t . $h = 0,25$, сетка 512×512 , усреднение по 100 реализациям

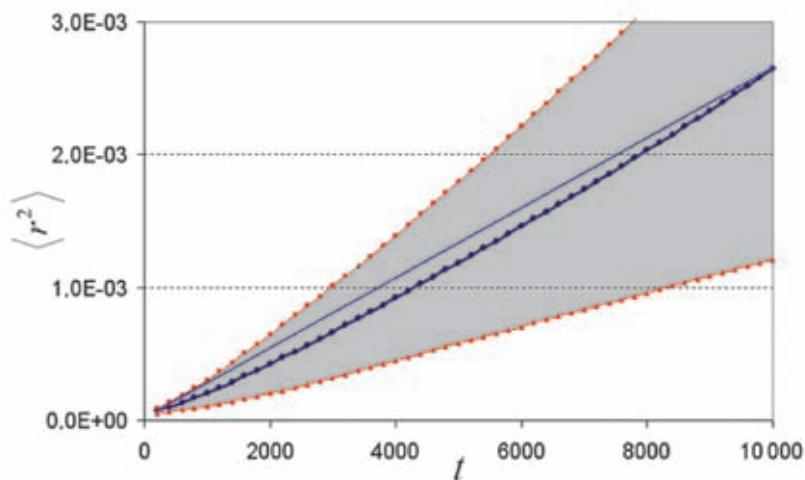


Рис. 1.2.26. График зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t . $h = 0,5$, сетка 512×512 , усреднение по 100 реализациям

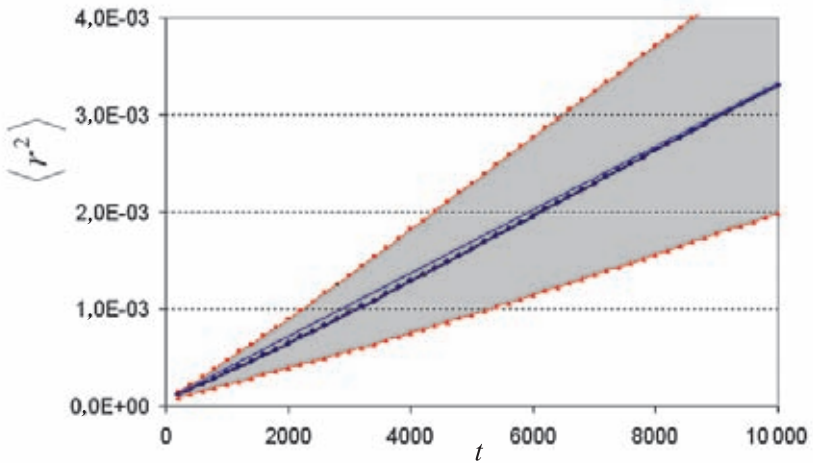


Рис. 1.2.27. График зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t . $h = 0,75$, сетка 512×512 , усреднение по 100 реализациям

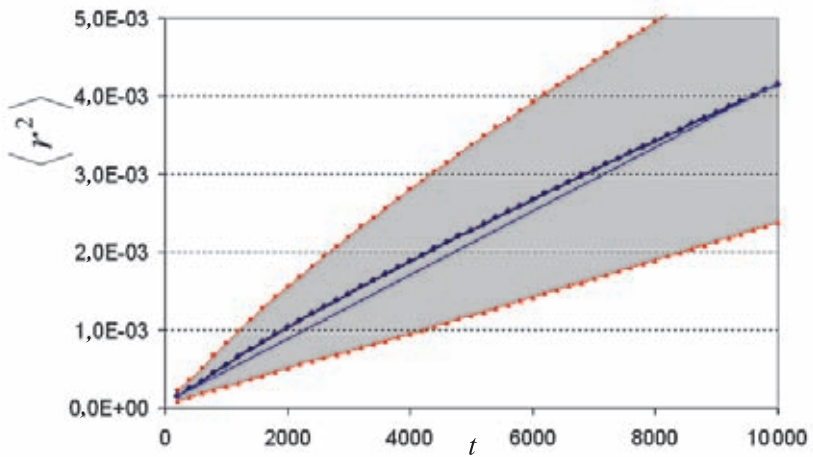


Рис. 1.2.28. График зависимости $\langle r^2 \rangle$ от t . $h = 1,5$, сетка 512×512 , усреднение по 100 реализациям

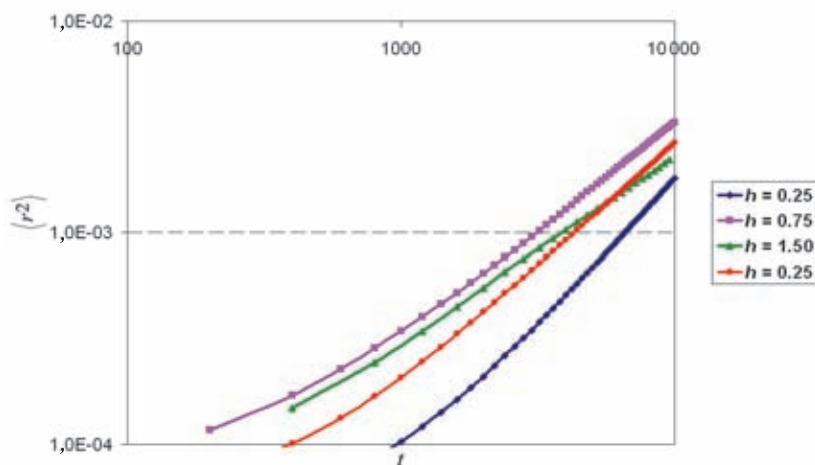


Рис. 1.2.29. Графики $\langle r^2 \rangle$ от t в логарифмическом масштабе. Сетка 256×256

Измельчение расчетной сетки привело к более точным оценкам параметра γ (см. табл. 1.2.2). Относительное отклонение γ^* от γ_{theor} не превосходит 13%.

Таблица 1.2.2. Сравнение численных (сетка 512×512 ячеек) и теоретических значений параметра γ

h	γ^*	γ_{theor}	Относительное отклонение, %
0,25	1,40	1,6	13
0,5	1,17	1,3333	12
0,75	1,04	1,1429	9
1,50	0,89	1,0	11

При расчете поведения концентрации в основной области ее изменения принципиальным оказывается корректный учет медленного убывания коррелятора случайного поля скоростей (коррелятор зависит от расстояния степенным образом). Это приводит к тому, что на результаты расчета концентрации примеси существенное влияние оказывает наличие границы и в частности соотношение между характерным размером облака примеси $R \sim t^{\frac{1}{1+h}}$ и половиной размера расчетной области L .

Например, если рассмотреть поляризационный оператор $M(p, q)$, определяющий поведение концентрации через функцию Грина:

$$G(p, q) = \frac{1}{p + M(p, q)},$$

нетрудно показать, что учет обрезания интегралов по q величиной $q_{\min} \sim L^{-1}$ приводит к поправке порядка $(qL)^{-2h}$, где $2h$ — показатель степенного убывания коррелятора скорости:

$$\tilde{M} = M + \delta M,$$

$$\delta M \sim (qL)^{-2h}.$$

Учитывая, что поведение концентрации примеси в основной области ее изменения определяется волновыми векторами порядка $q \sim R^{-1}$, при $h \approx 0,5$ имеем, что уже при $R/L \sim 0,1$ поправки к поляризационному оператору становятся ощутимыми. Это ограничивает пространственную область, в которой динамика основного облака примеси может быть корректно описана.

Дальнейшее увеличение числа узлов расчетной сетки, возможно, приведет к еще более точным результатам.

Тяжелые хвосты. На рис. 1.2.30—1.2.32 представлены линии уровня для отдельных решений задачи о стохастической адвекции в момент времени $t = 0,2$ для трех значений параметра h — 0,25, 0,75 и 1,50. На рис. 1.2.33—1.2.35 изображены линии уровня для усредненных по 160 реализациям решений. Как видно, чем меньше значение параметра h , тем дальше за конкретный промежуток времени t распространяется вещество.

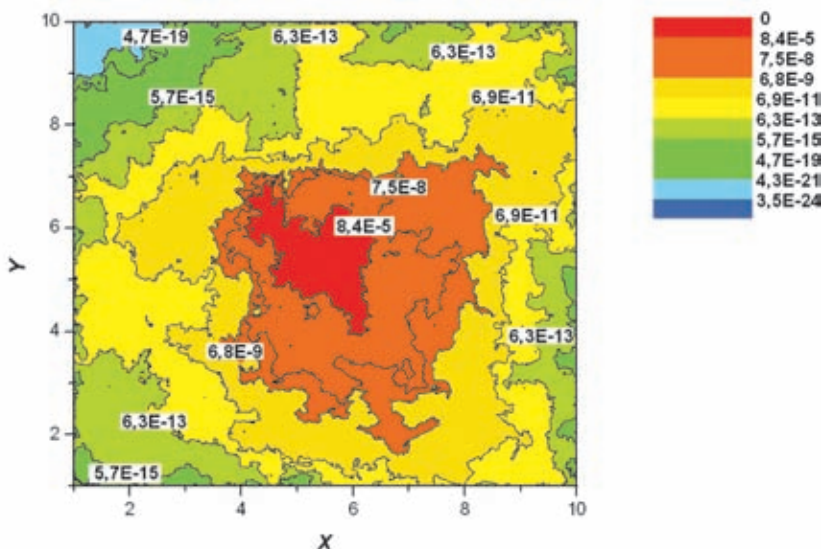


Рис. 1.2.30. Линии уровня для одного из решений. $h = 0,25$, сетка 512×512 , $t = 0,2$

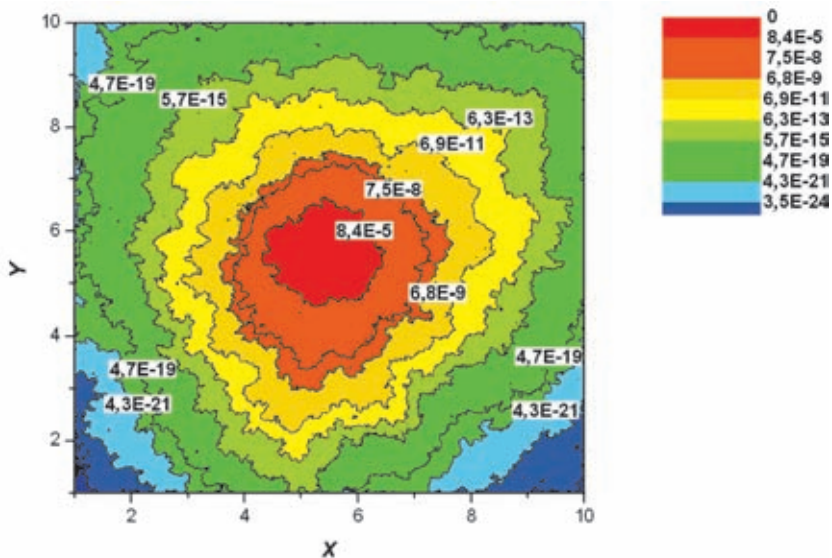


Рис. 1.2.31. Линии уровня для одного из решений. $h = 0,75$, сетка 512×512 , $t = 0,2$

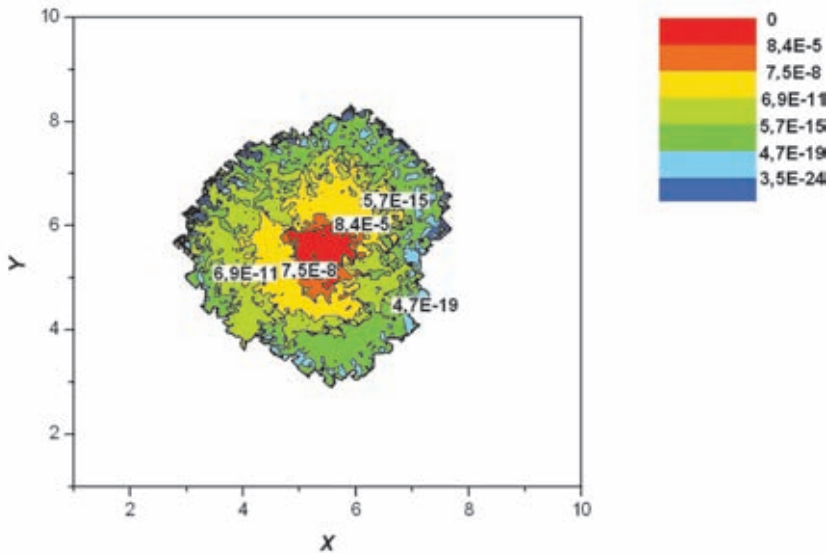


Рис. 1.2.32. Линии уровня для одного из решений. $h = 1,50$, сетка 512×512 , $t = 0,2$

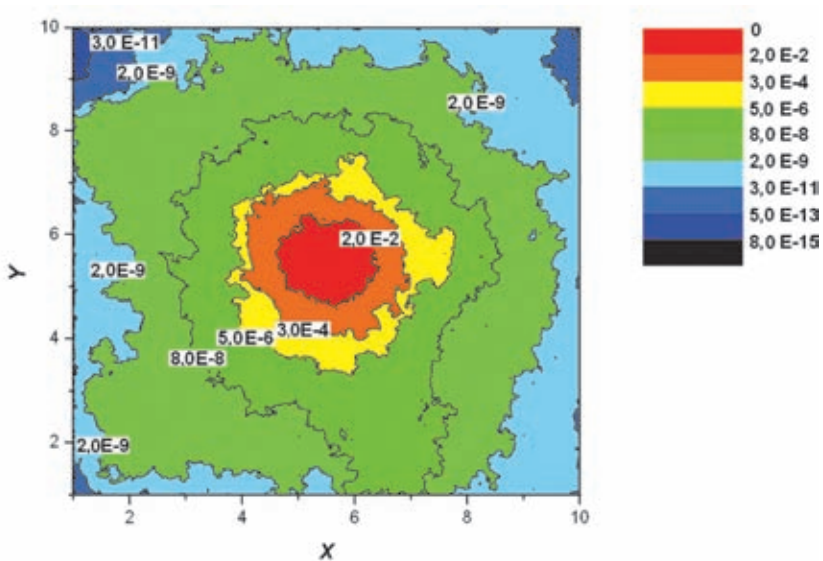


Рис. 1.2.33. Линии уровня для усредненного по 160 реализациям решения. $h = 0,25$, $t = 0,2$, $N = 512$

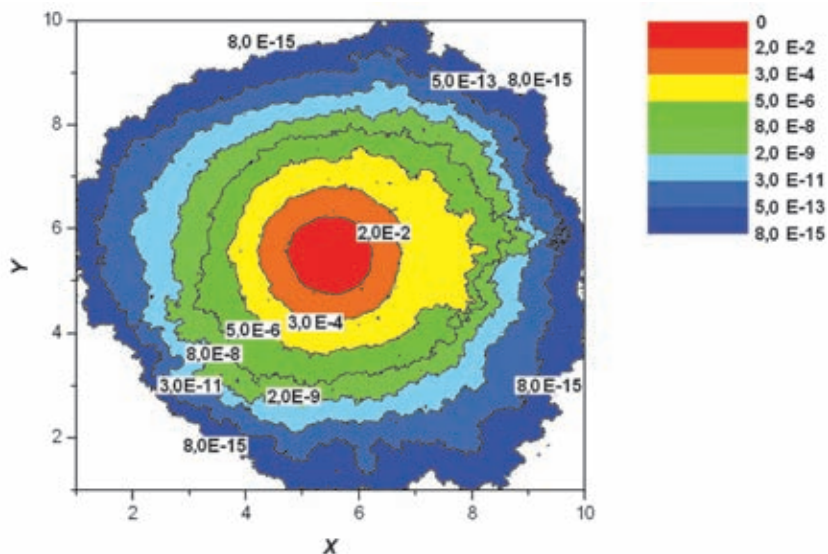


Рис. 1.2.34. Линии уровня для усредненного по 160 реализациям решения.
 $h = 0,75, t = 0,2, N = 512$

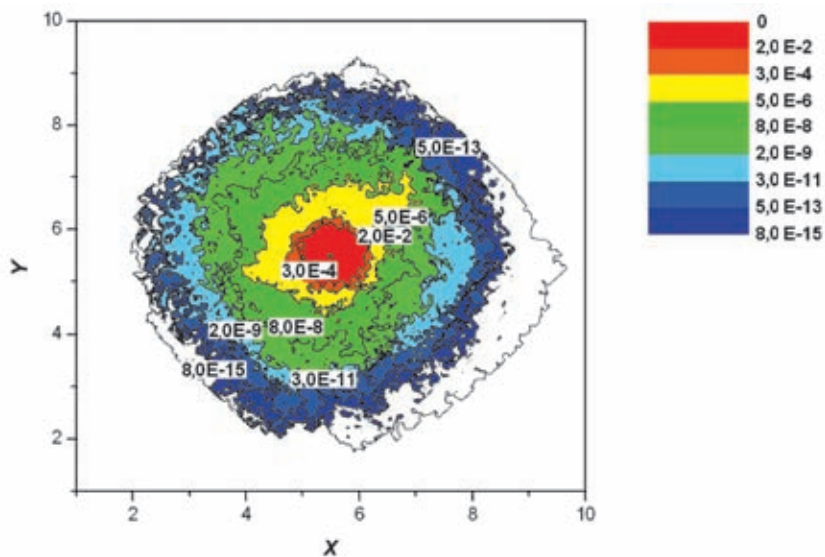


Рис. 1.2.35. Линии уровня для усредненного по 160 реализациям решения.
 $h = 1,50, t = 0,2, N = 512$

Для выявления закона, по которому происходит адвекция на случайных полях с различными корреляционными свойствами, можно поступить следующим образом. Разобьем расчетную область на систему вписанных друг в друга колец, как показано на **рис. 1.2.36**. Расстояние между кольцами всюду одинаковое, центры колец совпадают с серединой расчетной области. Наложив данные кольца на усредненные по многим реализациям решения (как на **рис. 1.2.33—1.2.35**), можно рассчитать средние значения концентраций в каждом из колец. Графики $\langle C \rangle$ от r , где r — радиус кольца; $\langle C \rangle$ — средняя концентрация в заданный момент времени в данном кольце, будут характеризовать в среднем закон убывания концентрации по мере удаления от источника начальных данных.

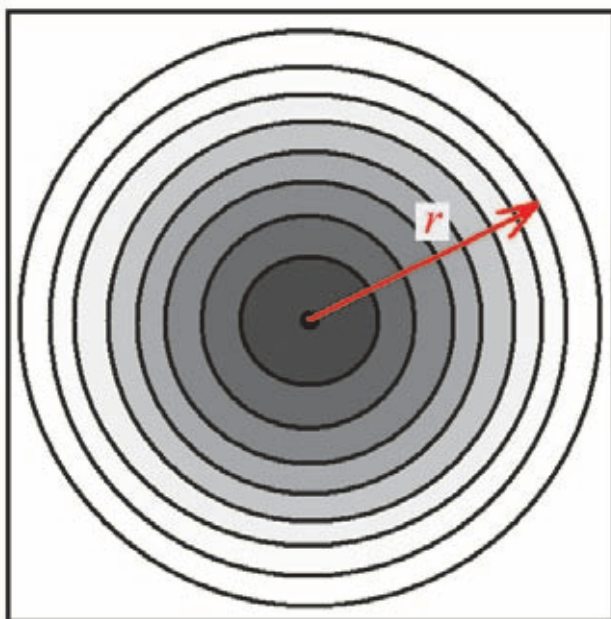


Рис. 1.2.36. Разбиение расчетной области на кольца

На **рис. 1.2.37** представлены графики зависимости $\langle C \rangle(r)$ для одного из значений параметра h в пять моментов времени. При построении данных графиков расчеты производились на сетке 512×512 узлов, решения усреднены по 100 реализациям. Расчетная область разбивалась на 40 колец.

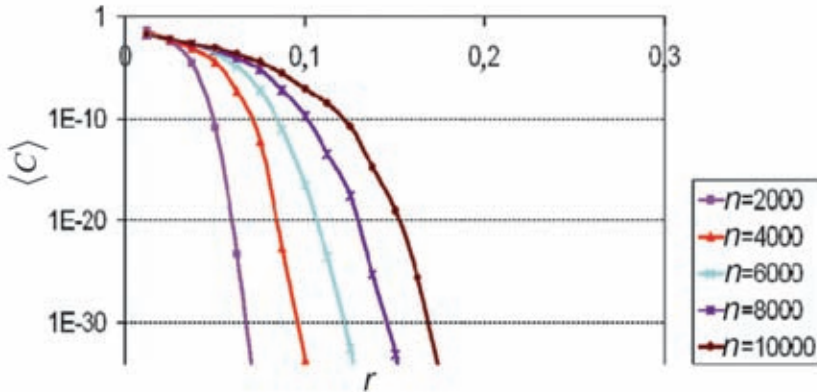


Рис. 1.2.37. Средние значения концентраций $\langle C \rangle$ в зависимости от расстояния от источника r : $h = 0,50$, сетка 512×512 .
 n — количество шагов по времени

Как показывает анализ, основной вклад в поведение концентрации на больших расстояниях r вносят гармоники с волновыми векторами q_* , удовлетворяющими условию

$$q_* r \approx \left(\frac{r}{R} \right)^{\frac{1+h}{h}}. \quad (1.2.40)$$

При этом оценка для концентрации на далеких расстояниях имеет вид

$$c(r, t) \sim \exp(-Aq_* r) = \exp(-\Gamma), \quad (1.2.41)$$

где $A < 1$.

Аппроксимируем представленные выше кривые (при $h < 1$) следующим выражением:

$$C \cdot \exp \left\{ -A \cdot \eta^{\frac{1+h}{h}} \right\}, \quad \eta = \frac{r}{R(t)}, \quad (1.2.42)$$

где A и C — константы для заданного h ; $R(t)$ — средний радиус облака примеси.

Результаты данной аппроксимации представлены на **рис. 1.2.38—1.2.40**. Теоретические кривые (1.2.41) (или (1.2.42)) для разных моментов времени и разных h хорошо согласуются с кривыми, полученными численно.

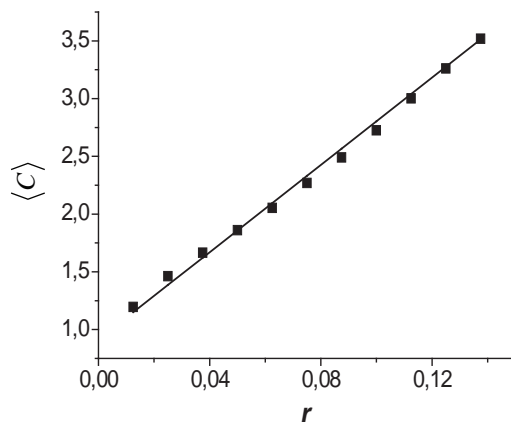


Рис. 1.2.38. Средние значения концентраций $\langle C \rangle$ в зависимости от расстояния от источника r : $n = 10\,000$, $h = 0,75$. Квадратные маркеры — расчетные данные, сплошная линия — теоретическая кривая

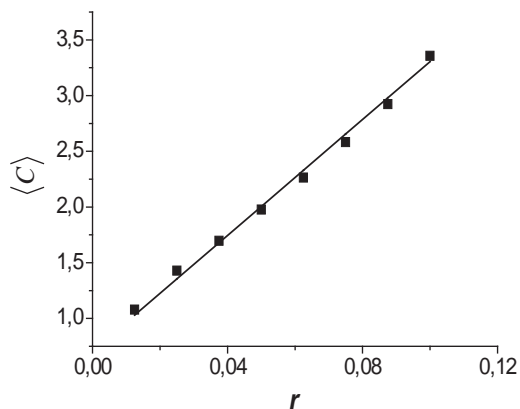


Рис. 1.2.39. Средние значения концентраций $\langle C \rangle$ в зависимости от расстояния от источника r : $n = 6000$, $h = 0,75$. Квадратные маркеры — расчетные данные, сплошная линия — теоретическая кривая

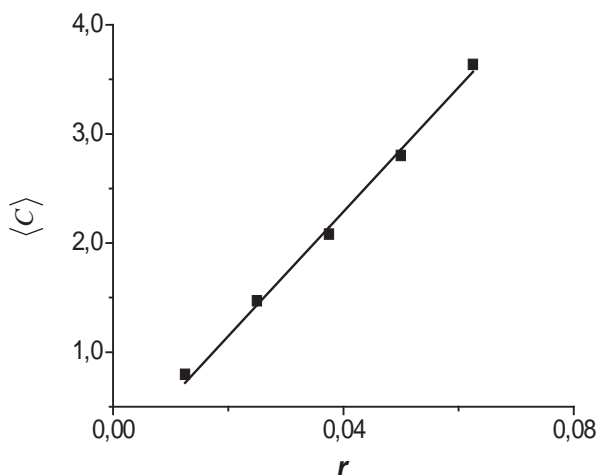


Рис. 1.2.40. Средние значения концентраций $\langle C \rangle$ в зависимости от расстояния от источника r . $n = 2000$, $h = 0,75$. Квадратные маркеры — расчетные данные, сплошная линия — теоретическая кривая

1.3. Случайная адвекция при наличии диффузии и дрейфа

В этом разделе исследуется более общая по сравнению с рассмотренной в предыдущем разделе модель переноса примеси. В дополнение к случайной адвекции здесь в качестве физического механизма переноса учитываются диффузия, в том числе ее случайная составляющая, а также дрейф примеси с постоянной скоростью. В такой постановке задача перестает быть масштабно инвариантной. Поэтому для ее решения вместо анализа масштабных размерностей мы воспользуемся аппаратом фейнмановских диаграмм.

Структура раздела такова. В подразделе 1.3.1 сформулирована модель. В подразделе 1.3.2 описана адекватная нашей задаче версия диаграммной техники. Ее эффективность проиллюстрирована на примере, в котором отсутствуют случайная диффузия и дрейф. В подразделе 1.3.3 проанализирована роль случайной диффузии в дополнение к случайной адвекции. Подраздел 1.3.4 посвящен решению задачи о случайной адвекции при наличии дрейфа.

1.3.1. Формулировка задачи

Основу модели, рассматриваемой в данном разделе, составляет уравнение для концентрации примеси $c(\vec{r}, t)$

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\bar{v}c - D\nabla c) = 0, \quad (1.3.1)$$

где $\bar{v}(\vec{r})$ и $D(\vec{r})$ — стационарные поля скорости адвекции и коэффициента диффузии соответственно. Функция $\bar{v}(\vec{r})$, как и ранее, удовлетворяет уравнению несжимаемости (1.1.2). Однако теперь будем считать, что среднее значение этой функции по ансамблю реализаций отлично от нуля. Соответственно величина $\bar{v}(\vec{r})$ разбивается на сумму двух слагаемых: \bar{u} описывает дрейф с постоянной скоростью и равно среднему значению $\bar{v}(\vec{r})$ по ансамблю реализаций, а \bar{v}' соответствует случайной составляющей, которая при усреднении обращается в нуль:

$$\begin{aligned} \bar{v}(\vec{r}) &= \bar{u} + \bar{v}'(\vec{r}), \\ \bar{u} &= \langle \bar{v}(\vec{r}) \rangle, \\ \langle \bar{v}'(\vec{r}) \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (1.3.2)$$

Точно так же коэффициент диффузии $D(\vec{r})$ складывается из среднего значения \bar{D} и случайной составляющей $D'(\vec{r})$, обращаемой в нуль при усреднении:

$$\begin{aligned} D(\vec{r}) &= \bar{D} + D'(\vec{r}), \\ \bar{D} &= \langle D(\vec{r}) \rangle, \\ \langle D'(\vec{r}) \rangle &= 0. \end{aligned} \quad (1.3.3)$$

Предположим, что \bar{u} и \bar{D} однородны в пространстве и что корреляционные свойства случайной составляющей скорости $\bar{v}'(\vec{r})$ совпадают с теми, которые в предыдущем разделе были заданы для функции $\bar{v}(\vec{r})$ (см. (1.1.3)—(1.1.9)). Символ h теперь обозначает масштабную размерность величины $\bar{v}'(\vec{r})$. Будем считать, что случайная составляющая коэффициента диффузии $D'(\vec{r})$ обладает корреляционными свойствами, аналогичными (1.1.3)—(1.1.9). При этом масштабную размерность величины

$D'(\vec{r})$ обозначим f . Поэтому $(n + m)$ — точечная корреляционная функция, получающаяся усреднением произведения n множителей \vec{v}' и m множителей D' (все множители с разными аргументами), является однородной функцией $(nh + mf)$ -го порядка.

1.3.2. Диаграммная техника

Концентрация частиц, удовлетворяющая уравнению (1.3.1), в произвольный момент времени может быть выражена через свое начальное распределение так:

$$c(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' g(\vec{r}, \vec{r}'; t) c(\vec{r}', 0), \quad (1.3.4)$$

где функция $g(\vec{r}, \vec{r}'; t)$ удовлетворяет уравнению

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} v_i(\vec{r}) - \frac{\partial}{\partial x_i} D \frac{\partial}{\partial x_i} \right\} g(\vec{r}, \vec{r}'; t) = 0 \quad (1.3.5)$$

с начальным условием

$$g(\vec{r}, \vec{r}'; 0) = \delta(\vec{r} - \vec{r}'), \quad (1.3.6)$$

где $\delta(\vec{r} - \vec{r}')$ — дельта-функция.

Усредняя (1.3.4), приходим к соотношению (1.1.13) с функцией Грина $G(\vec{r} - \vec{r}', t)$, определенной равенством

$$G(\vec{r} - \vec{r}', t) \equiv \langle g(\vec{r}, \vec{r}'; t) \rangle. \quad (1.3.7)$$

Физический смысл функции Грина $G(\vec{r} - \vec{r}', t)$ совпадает со смыслом аналогичной функции, введенной в разделе 1.1. Однако теперь наряду со случайной адвекцией функция Грина учитывает также диффузию и дрейф как дополнительные механизмы переноса. Вычисление $G(\vec{r} - \vec{r}', t)$ удобно производить методами квантовой теории поля на основе «крестовой» диаграммной техники [6]. Кратко изложим ее основные положения.

В представлении Фурье по пространственным координатам и Лапласа по времени

$$G\{\vec{k}, p\} = \int_0^{\infty} dt \int d^3\vec{r} e^{-p t - i\vec{k}\vec{r}} G(\vec{r}, t)$$

с учетом (1.3.5), начального условия (1.3.6) и равенств (1.3.2), (1.3.3) функция Грина принимает вид

$$G\{\bar{k}, p\} = \frac{1}{p + i\bar{k}\bar{u} + \bar{D}k^2 - M(\bar{k}, p)}, \quad (1.3.8)$$

где \bar{k} и p — переменные Фурье и Лапласа; $M(\bar{k}, p)$ — поляризационный оператор, представляющий собой сумму неприводимых скелетных диаграмм [6]:

$$M(\bar{k}, p) = \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \text{---} & & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & & \text{---} \end{array} + \begin{array}{ccc} \text{---} & & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & & \text{---} \end{array} + \\ + \begin{array}{ccc} \text{---} & & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & & \text{---} \end{array} + \begin{array}{ccc} \text{---} & & \text{---} \\ \text{---} & \text{---} & \text{---} \\ \text{---} & & \text{---} \end{array} + \dots \end{array} \quad (1.3.9)$$

Здесь горизонтальные линии соответствуют функции G , кресты отвечают оператору возмущения

$$\hat{T} = -v'_i(\bar{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} D'(\bar{r}) \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad (1.3.10)$$

а пунктирные линии объединяют кресты, относящиеся к одному из кумулянтов (см. [7]), разложение по которым составляет существо процедуры усреднения по ансамблю реализаций. Подобно функциям G , поляризационный оператор $M(\bar{k}, p)$ по физическому смыслу аналогичен функции

$M(\bar{k}, p)$ из раздела 1.1, но теперь, как и фигурирующая в настоящем разделе функция Грина, учитывает диффузию и дрейф. Помимо флуктуаций скорости и коэффициента диффузии каждый крест в (1.3.9), согласно определению (1.3.10) содержит градиенты. В представлении Фурье они сводятся к волновым векторам, причем для слагаемого с D' получается произведение волновых векторов, относящихся к двум G -линиям (один — к правой относительно креста, второй — к левой линии), а для члена с \vec{v}' в соответствии с (1.3.2) возникает только один волновой вектор любой из этих линий. Каждому исходящему из креста пунктиру отвечает свой волновой вектор, по которому происходит интегрирование. После подстановки равенства (1.3.8) в диаграммное разложение (1.3.9) последнее превращается в интегральное уравнение для функции $M(\bar{k}, p)$.

Далее в качестве иллюстрации применим диаграммную технику к упрощенному варианту задачи, в котором отсутствуют случайная составляющая диффузии и дрейф, т. е.

$$D'(\vec{r}) = 0, \quad \vec{u} = 0. \quad (1.3.11)$$

В этой постановке в дополнение к случайной адвекции в качестве механизма переноса присутствует классическая диффузия с постоянным коэффициентом \bar{D} .

Начнем рассмотрение с диаграммы второго порядка (с двумя крестами). Ее вклад в поляризационный оператор

$$M_2(\vec{k}, p) = \begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \times \text{---} \times \end{array} \quad (1.3.12)$$

в соответствии со сформулированными выше правилами диаграммной техники дается выражением

$$M_2(\vec{k}, p) = -k_i k_j \int d^3 q \frac{K_{ij}^{(2)}\{\vec{q}\}}{p + \bar{D}|\vec{k} - \vec{q}|^2 - M(\vec{k} - \vec{q}, p)}, \quad (1.3.13)$$

где функция $K_{ij}^{(2)}\{\vec{q}\}$ — Фурье-образ двухточечной корреляционной функции скоростей, которая определена в предыдущем разделе. Эта же функция представляет собой кумулянт второго порядка, возникающий при усреднении произведения случайных скоростей.

Предположим, что $M(\vec{k}, 0) \propto k^2$, и проанализируем поведение интеграла в правой части (1.3.13) в пределе $p = 0$, $\vec{k} \rightarrow 0$. Это поведение, очевидно, зависит от значения параметра h , определяющего согласно (1.1.9) вид функции $K_{ij}^{(2)}\{\vec{q}\}$ в длинноволновом пределе:

$$K_{ij}^{(2)}\{\vec{q}\} \propto q^{2h-3} \text{ при } qa \ll 1. \quad (1.3.14)$$

При $h > 1$ основной вклад в интеграл дают большие значения переменной интегрирования, $q \sim a^{-1}$. Поэтому при интересующих нас значениях волнового вектора $k \ll a^{-1}$ интеграл не зависит от волнового вектора с точ-

ностью до малых поправок $\sim ka$, и мы получим $M_2(\vec{k}, 0) \propto k^2$ в согласии с исходным предположением $M(\vec{k}, 0) \propto k^2$.

При $h \leq 1$ интеграл в (1.3.13) с учетом (1.3.14) сходится в области значений переменной интегрирования $q \sim k$, и при $k \rightarrow 0$ он стремится к бесконечности, а не к конечной величине, как при $h > 1$. Полученные утверждения позволяют предположить, что

$$M \propto k^2 \text{ при } h > 1, \quad (1.3.15)$$

$$|M| \gg \bar{D}k^2 \text{ при } h \leq 1. \quad (1.3.16)$$

Докажем справедливость этих предположений во всех порядках диаграммного разложения (1.3.9).

Выделим в каждой диаграмме множитель k^2 , происходящий от двух крайних крестов, и представим функцию $M(\vec{k}, p)$ в виде

$$M(\vec{k}, p) = k^2 L(\vec{k}, p) = k^2 \sum_{n=2}^{\infty} L_n(\vec{k}, p), \quad (1.3.17)$$

где $L_n(\vec{k}, p)$ — вклад в $L(\vec{k}, p)$, даваемый совокупностью n -крестовых диаграмм. Величина $L_n(\vec{k}, p)$ выражается многомерным интегралом от произведения $n-1$ функций Грина и определенного количества корреляционных функций. Посмотрим, как меняется вклад многомерного интегрирования по области малых волновых векторов $\{q_i\}$ ($\ll a^{-1}$) (по абсолютной величине много меньше величины a^{-1}) при переходе от L_n к L_{n+1} , т. е. с увеличением количества крестов на единицу. Изменение совокупного показателя степени q_i под интегралом при таком переходе состоит из двух частей. Первая происходит от возникающего дополнительного пунктира и с учетом свойства (1.1.8) равна $1+h$ (единица — за счет $\partial/\partial x_i$ в (1.3.10)). Вторая часть получается из-за увеличения на единицу количества функций Грина. Пусть $M(\vec{k}, 0) \propto k^2$. Тогда вторая часть изменения показателя, о котором идет речь, с учетом (1.3.8) равна -2 . Таким образом, суммарное изменение показателя будет равно $h-1$. Отсюда заключаем, что при $h > 1$ в интеграле для L_n при переходе $L_n \rightarrow L_{n+1}$ возрастает

роль области больших волновых векторов, а при $h \leq 1$ — роль малых волновых векторов. Этот вывод в сочетании с тем, к которому мы пришли ранее для L_2 , подтверждает предположения (1.3.15) и (1.3.16). В частности, из него следует, что в диаграмме любого порядка при $h > 1$ существенна область интегрирования по волновым векторам $q_l \sim a^{-1}$, а при $h \leq 1$ — область $q_l \ll a^{-1}$.

Формула (1.3.15) означает, что при $h > 1$ перенос частиц происходит по законам классической диффузии независимо от того, входит ли она в состав исходного механизма переноса (равен или не равен нулю коэффициент \bar{D}). С другой стороны, из соотношения (1.3.16) вытекает, что при масштабной размерности скорости $h \leq 1$ вкладом классического диффузионного механизма можно пренебречь. Поэтому, переходя к диаграммному анализу задачи при $h \leq 1$, положим далее $\bar{D} = 0$. Отдельно рассмотрим случаи $h < 1$ и $h = 1$.

1. $h < 1$. Тот факт, что интегральные ядра в правой части (1.3.9) при $q_l \ll 1$ являются однородными функциями, дает основание предположить, что функция $M(\vec{k}, p)$ обладает свойством симметрии относительно масштабных преобразований. Это свойство может быть выражено соотношением

$$M(\lambda \vec{k}, \lambda^{\Delta'} p) = \lambda^{\Delta} M(\vec{k}, p). \quad (1.3.18)$$

Напомним, что λ — произвольное вещественное положительное число. Параметры Δ и Δ' будем называть масштабными индексами соответственно поляризационного оператора и переменной Лапласа. Поведение поляризационного оператора должно быть согласовано с поведением функции Грина. Поэтому, если (1.3.18) верно, то в соответствии с формулой (1.3.8) (в ней мы полагаем $\vec{u} = 0$, $\bar{D} = 0$) должны выполняться соотношения

$$G(\lambda \vec{k}, \lambda^{\Delta'} p) = \lambda^{-\Delta} G(\vec{k}, p), \quad (1.3.19)$$

$$\Delta' = \Delta. \quad (1.3.20)$$

Займемся доказательством (1.3.18). Попробуем найти Δ_n — масштабный индекс n -го слагаемого в разложении (1.3.17). При этом одновременно с преобразованием $\vec{k} \rightarrow \lambda \vec{k}$ произведем переход в интеграле от системы переменных интегрирования $\{q_l\}$ к системе $\lambda \{q_l\}$. В результате каждый из элементов диаграммы, соответствующих $k^2 L_n(\vec{k}, p)$, приобретет

множитель в виде λ^{Δ_n} . Показатель Δ_n равен сумме соответствующих показателей числа λ всех элементов диаграммы. Из них n -точечная группа корреляторов скорости вместе с дифференциалами внутренних волновых векторов $\{q_i\}$ дадут вклад nh , n градиентов дадут n и, наконец, от $n-1$ функций Грина получится вклад $-(n-1)\Delta$. Приравнявая сумму всех перечисленных вкладов показателю Δ_n , приходим к равенству

$$nh + n - (n-1)\Delta = \Delta_n. \quad (1.3.21)$$

Соотношение (1.3.18) справедливо при условии, что показатель Δ_n не зависит от n и равен Δ :

$$\Delta_n = \Delta. \quad (1.3.22)$$

Подставляя (1.3.22) в уравнение (1.3.21) и разрешая его затем относительно Δ , находим масштабный индекс поляризационного оператора:

$$\Delta = 1 + h. \quad (1.3.23)$$

Тот факт, что это решение оказалось не зависящим от порядка диаграммы, и является доказательством справедливости предположений (1.3.18)—(1.3.20).

Из (1.3.19) и (1.3.20) с учетом (1.3.23) следует представление поляризационного оператора $M(\vec{k}, p) = -p\varphi(\eta)$ (см. (1.1.29) и (1.1.14); ср. также (1.1.27) и (1.1.30)) через функцию автомодельной переменной η , определенной равенством (1.1.28).

При $\vec{k} = 0$ и $p \neq 0$ интеграл в (1.3.13) сходится. Точно так же ведут себя интегралы в $L_n(0, p)$ благодаря отсутствию особенностей при $q_i \rightarrow 0$, $p \neq 0$. По той же причине остаются конечными и все производные $L_n(\vec{k}, p)$ по \vec{k} при $p \neq 0$, $\vec{k} \rightarrow 0$. Отсюда следует регулярность разложения функции $\varphi(\eta)$ при $\eta \ll 1$ (см. (1.1.32)). Из (1.3.18) с учетом (1.3.23) следует, что при нулевом значении переменной Лапласа

$$M(\vec{k}, 0) \propto k^{1+h}. \quad (1.3.24)$$

Отсюда и на основе (1.1.29) и (1.1.28) приходим к предельному выражению (1.1.33) при $\eta \gg 1$. Тем самым диаграммный анализ подтверждает

найденные в разделе 1.1 основные соотношения для поляризационного оператора при $h < 1$.

2. $h = 1$. Подстановка $M(\vec{k}, p) \propto k^2$ в интеграл (1.3.13) при $h = 1$ приводит к логарифмической расходимости: $M_2 \propto k^2 \ln \mu$,

где

$$\mu = \min \left\{ (ka)^{-1}, \sqrt{\frac{V}{ap}} \right\}. \quad (1.3.25)$$

Такое поведение диаграммы второго порядка дает основание в логарифмическом приближении искать поляризационный оператор в виде

$$M(\vec{k}, p) = -\tilde{D}k^2 (\ln \mu)^\alpha, \quad \tilde{D} \sim Va \quad (1.3.26)$$

с показателем $\alpha > 0$. В произвольной диаграмме порядка $n > 2$ от интегрирования по волновым векторам тоже возникает логарифм, но она по сравнению с диаграммой второго порядка содержит дополнительно произведение $n - 2$ функций Грина, которое в соответствии с (1.3.26) и (1.3.8) дает малый множитель $(\ln \mu)^{-\alpha(n-2)}$. Отсюда следует, что при вычислении поляризационного оператора можно ограничиться скелетной диаграммой с двумя крестами, и, значит, равенство (1.3.13) превращается в соотношение

$$M(\vec{k}, p) \sim -(\tilde{D}k)^2 \int dq \frac{q}{p - M(\vec{k} - \vec{q}, p)}. \quad (1.3.27)$$

Подстановка сюда (1.3.26) приводит к уравнению

$$\alpha = 1 - \alpha,$$

откуда $\alpha = 1/2$. Подстановка этого значения в (1.3.26) подтверждает полученную в разделе 1.1 формулу для поляризационного оператора при $h = 1$ (1.1.47).

Таким образом, в настоящем разделе получено диаграммное доказательство результатов раздела 1.1 и показано, что присутствие классической диффузии с не зависящим от координат коэффициентом в качестве механизма переноса, дополнительного к случайной адвекции, не влияет на тип режима переноса.

1.3.3. Роль случайной диффузии

В этом подразделе наряду со случайной адвекцией и усредненной составляющей диффузии, о влиянии которых речь шла выше, учтем также случайную компоненту диффузии, считая по-прежнему, что дрейф отсутствует ($\vec{u} = 0$). Оценим первую поправку к поляризованному оператору за счет случайной диффузии. Она получается из диаграмм, анализировавшихся в разделе 1.3.2, заменой

$$-v'_i(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_i} \rightarrow \frac{\partial}{\partial x_i} D'(\vec{r}) \frac{\partial}{\partial x_i}, \quad (1.3.28)$$

которую следует произвести в одном из крестов для каждой диаграммы.

Обозначим $L_n^{(0)}(\vec{k}, p)$ не возмущенную заменой (1.3.28) величину L_n из (1.3.17), соответствующую суммарному вкладу диаграмм n -го порядка, и рассмотрим возмущение $L_n^{(1)}(\vec{k}, p)$, возникающее в результате замены (1.3.28). Положим сначала $h \leq 1$. Согласно предыдущему разделу имеем

$$L_n^{(0)}(\vec{k}, 0) \propto \begin{cases} k^{-(1-h)} & \text{при } h < 1, \\ \ln\left(\frac{1}{ka}\right) & \text{при } h = 1. \end{cases}$$

Отсюда следует, что суммарный показатель степени волновых векторов (вместе с дифференциалами) под интегралом для величины $L_n^{(0)}(\vec{k}, p)$ при $k \ll q_l \ll a^{-1}$ равен

$$\Delta_0 = -(1-h). \quad (1.3.29)$$

Поскольку этот показатель меньше нуля или ему равен, интеграл для $L_n^{(0)}(\vec{k}, p)$ сходится при малых волновых векторах ($q_l \ll a^{-1}$).

Суммарный показатель степени Δ_1 волновых векторов (вместе с дифференциалами) под интегралом для величины $L_n^{(1)}(\vec{k}, p)$ получается прибавлением к (1.3.29) двух слагаемых. Одно из них, $f - h$, является результатом различия в масштабных индексах случайных величин коэффициента диффузии и скорости (см. конец подраздела 1.3.1). Второе слагаемое, 1, получается за счет дополнительного градиента, который возникает при замене (1.3.28). В итоге с учетом (1.3.29) получаем

$$\Delta_1 = f. \quad (1.3.30)$$

То, что величина Δ_1 оказалась существенно положительной, означает, что интеграл в $L_n^{(1)}(\vec{k}, p)$ сходится на больших волновых векторах $q_i \sim a^{-1}$. Это, в свою очередь, означает, что с точностью до малых поправок $\sim ka$ функция $L_n^{(1)}(\vec{k}, p)$ является константой и потому при $h \leq 1$ она мала по сравнению с $L_n^{(0)}(\vec{k}, p)$. Поскольку вывод не зависит от порядка диаграммы, это же относится и ко всей сумме

$$L^{(1)}(\vec{k}, p) = \sum_{n=2}^{\infty} L_n^{(1)}(\vec{k}, p).$$

Из приведенных рассуждений понятно, что вывод о малости сохраняется и по отношению ко всем поправкам более высоких порядков, возникающих в результате замены (1.3.28) в дополнительных крестах. Поэтому добавка к поляризованному оператору (см. (1.3.17)) за счет случайной диффузии пропорциональна k^2 и при $h \leq 1$ является малой по сравнению с величиной поляризованного оператора $M(\vec{k}, p)$, вычисленной без учета случайной диффузии.

В случае $h > 1$ вывод о том, что добавка к поляризованному оператору за счет случайной составляющей диффузии пропорциональна k^2 , сохраняет силу, поэтому ее учет ведет лишь к перенормировке коэффициента диффузии.

Таким образом, случайная диффузия не приводит к изменениям типа режима переноса. Она может лишь дать перенормировку эффективного коэффициента диффузии при значениях масштабной размерности случайной скорости $h > 1$.

1.3.4. Случайная адвекция при наличии дрейфа

В этом подразделе проанализируем задачу о случайной адвекции при наличии дрейфа с постоянной скоростью \vec{u} . С учетом выводов предыдущего подраздела положим равными нулю как случайную, так и среднюю величины коэффициента диффузии и будем рассматривать нетривиальный случай, когда масштабная размерность скорости меньше единицы ($h < 1$).

Очевидно, что перенос за счет средней составляющей поля скоростей сам по себе более эффективен, чем благодаря флуктуациям скорости. Поэтому

реальный смысл имеет только задача, в которой средняя скорость намного меньше флуктуационной. Именно этот случай мы и будем рассматривать:

$$u \ll V. \quad (1.3.31)$$

Настоящий подраздел построен следующим образом: сначала проанализируем свойства поляризационного оператора, затем установим общие закономерности поведения концентрации и в заключение найдем асимптотические зависимости концентрации на больших расстояниях от источника.

Поляризационный оператор. Анализ удобно проводить, перейдя из лабораторной системы координат в сопутствующую, движущуюся со скоростью \vec{u} . Это приведет к замене пространственной переменной:

$$\vec{r} \rightarrow \vec{r}' = \vec{r} - \vec{u}t. \quad (1.3.32)$$

В представлении Фурье—Лапласа при этом также произойдет замена:

$$p \rightarrow p' = p + i\vec{k}\vec{u}. \quad (1.3.33)$$

В новых переменных Фурье—Лаплас-образ функции Грина (1.3.8) будет иметь вид

$$\tilde{G}\{\vec{k}, p'\} = \frac{1}{p' - \tilde{M}(\vec{k}, p')}. \quad (1.3.34)$$

Наличие дрейфа приводит к возникновению параметра времени t_* , соответствующего моменту, когда длина дрейфа ut сравнивается размером области локализации частиц при $\vec{u} = 0$ $R(t) = (Va^h t)^{1/(1+h)}$ (см. (1.1.38)):

$$t_* = \frac{a}{u} \left(\frac{V}{u} \right)^{\frac{1}{h}}. \quad (1.3.35)$$

С этим временем связано характерное значение волнового вектора

$$k_* = (ut_*)^{-1} = a^{-1} \left(\frac{u}{V} \right)^{\frac{1}{h}}. \quad (1.3.36)$$

Нетрудно убедиться, что при $k \sim k_*$ поляризационный оператор в задаче о случайной адвекции без дрейфа $M(\vec{k}, p) \sim Va^h k^{1+h}$ (см. раздел 1.1) сравнивается с величиной uk . Поэтому имеют место соотношения

$$\begin{aligned} uk \ll M(\vec{k}, p) \Big|_{\vec{u}=0} & \text{ при } k \gg k_*, \\ uk \gg M(\vec{k}, p) \Big|_{\vec{u}=0} & \text{ при } k \ll k_*. \end{aligned} \quad (1.3.37)$$

Ниже мы покажем, что поляризационный оператор имеет различную структуру в двух случаях: при $k \gg k_*$ и при $k \ll k_*$. Проанализируем отдельно каждый из них.

1. $k \gg k_*$. Предположим, что первое из неравенств (1.3.37) остается справедливым и при замене $M(\vec{k}, p) \Big|_{\vec{u}=0} \rightarrow \tilde{M}(\vec{k}, p')$, т. е. что

$$uk \ll \tilde{M}(\vec{k}, p') \Big| \text{ при } k \gg k_*. \quad (1.3.38)$$

Если это так, то во всех диаграммах из (1.3.9), выписанных теперь для $\tilde{M}(\vec{k}, p')$, слагаемыми типа $\vec{u}\vec{q}_l$ в знаменателях функций Грина можно пренебречь по сравнению с $\tilde{M}(\vec{k} - \vec{u}\vec{q}_l, p')$. В результате диаграммное уравнение (1.3.9) совпадет с уравнением для функции $M(\vec{k}, p)$ при $\vec{u} = 0$ и мы получим

$$\tilde{M}(\vec{k}, p') \cong M(\vec{k}, p) \Big|_{\vec{u}=0} \text{ при } k \gg k_*. \quad (1.3.39)$$

Таким образом, сформулированное предположение (1.3.38) оправдывается.

2. $k \ll k_*$. Приступая к анализу свойств поляризационного оператора при малых волновых векторах, сделаем ряд предварительных оценок. Из самого вывода соотношения (1.3.39) следует, что при малых волновых векторах выполняется неравенство, противоположное (1.3.38):

$$\tilde{M}(\vec{k}, p') \ll uk \text{ при } k \ll k_*. \quad (1.3.40)$$

Существуют три характерных области волновых векторов q_l , вносящих вклад в соответствующие диаграммным выражениям интегралы для модифицированного поляризационного оператора. Это области $q_l \sim k_*$, $q_l \sim k$ и $q_l \sim \frac{\tilde{M}^{(0)}}{u}$. Оценим отдельно вклад каждой из них.

Обозначим $\tilde{M}^{(0)}$ вклад, возникающий от области интегрирования $q_l \sim k_*$. Заметим, что при $k \sim k_*$ он имеет порядок uk_* . Если при этом учесть, что при переходе от $k \sim k_*$ к $k \ll k_*$ порядки величин подынтегральных выражений останутся прежними, а множитель $\sim k_*^2$, возникающий от крайних крестов (левого и правого) в каждой диаграмме, заменится на k^2 , то получим оценку

$$\tilde{M}^{(0)} \sim uk_* \left(\frac{k}{k_*} \right)^2 \text{ при } k \ll k_*. \quad (1.3.41)$$

Существенно, что эта оценка вклада области $q_l \sim k_*$ справедлива не только для поляризационного оператора в целом, но и для каждой диаграммы в отдельности (любого порядка).

Обозначим далее $\tilde{M}_n^{(1)}$ вклад в диаграмму n -го порядка от области интегрирования $q_l \sim k$. Отношение $\tilde{M}_n^{(1)}$ к $\tilde{M}^{(0)}$ определяется произведением

трех сомножителей. Первый, $\left(\frac{k}{k_*} \right)^{n-2}$, возникает оттого, что при переходе

от $\tilde{M}^{(0)}$ к $\tilde{M}_n^{(1)}$ волновые векторы, происходящие от $n-2$ внутренних крестов, теперь имеют порядок k вместо k_* . Второй сомножитель,

$\left(\frac{k}{k_*} \right)^{nh}$, образуется из-за перехода $k_* \rightarrow k$ в корреляционных функциях

и в объеме интегрирования по области $q_l \sim k$. Третий сомножитель,

$\left(\frac{k}{k_*} \right)^{-(n-1)}$, получается в результате того, что каждая из $n-1$ \tilde{G} -функций

при $q_l \sim k$ имеет порядок $(uk)^{-1}$ вместо $(uk_*)^{-1}$, как было при $q_l \sim k_*$.

Собирая все сомножители вместе, получаем оценку

$$\frac{\tilde{M}_n^{(1)}}{\tilde{M}^{(0)}} \sim \left(\frac{k}{k_*} \right)^{nh-1}. \quad (1.3.42)$$

Обратимся, наконец, к третьей характерной области интегрирования

$q_l \sim \frac{\tilde{M}^{(0)}}{u}$. Ее вклад в \tilde{M} обозначим $\tilde{M}_n^{(2)}$ для диаграммы n -го порядка.

Поступая так же, как в предыдущем случае, находим оценку для отношения этого вклада к величине $M^{(0)}$:

$$\frac{\tilde{M}_n^{(2)}}{\tilde{M}^{(0)}} \sim \left(\frac{k}{k_*} \right)^{n(2h-1)}. \quad (1.3.43)$$

Оценки (1.3.42) и (1.3.43) показывают, что при масштабной размерности $\frac{1}{2} < h < 1$ в области малых волновых векторов $k \ll k_*$ вклады $\tilde{M}_n^{(1)}$ и $\tilde{M}_n^{(2)}$ малы по сравнению с $\tilde{M}^{(0)}$. Поэтому величина $\tilde{M}(\vec{k}, p')$ по порядку величины совпадает с $\tilde{M}^{(0)}$, так что для нее справедлива оценка (1.3.41). Таким образом, поляризационный оператор при $k \ll k_*$, как и в режиме классической диффузии, оказывается пропорциональным квадрату волнового вектора при таких значениях h . Особенность рассматриваемого здесь случая $\vec{u} \neq 0$, $k \ll k_*$, $h > 1/2$ состоит в том, что функция $\tilde{M}(\vec{k}, p')$ должна зависеть от взаимной ориентации векторов \vec{k} и \vec{u} . Поэтому имеем:

$$\begin{aligned} \tilde{M}(\vec{k}, p') &= -D_{ij} k_i k_j, \quad D_{ij} \sim u k_*^{-1} \\ \text{при } k \ll k_*, \quad \frac{1}{2} < h < 1. \end{aligned} \quad (1.3.44)$$

Квадратичная форма $D_{ij} k_i k_j$ является положительно определенной. Симметричный тензор второго ранга D_{ij} приводится к диагональному виду в системе координат, одна из осей которой ориентирована вдоль вектора \vec{u} (при этом два главных значения, соответствующие перпендикулярным вектору \vec{u} компонентам, совпадают).

Из оценок (1.3.42) и (1.3.43) вытекает, что при $0 < h < \frac{1}{2}$ поляризационный оператор во всех порядках диаграммного разложения определяется областью интегрирования, соответствующей $u q_l \sim \tilde{M}$. Отсюда имеем $q_l \ll k$. Это дает основание пренебречь волновыми векторами пунктирных линий \vec{q}_l под знаками интегралов по сравнению с вектором \vec{k} как в аргументах поляризационных операторов (заменяв последние, таким образом, на $\tilde{M}(\vec{k}, p')$), так и в сомножителях, возникающих от градиентов. В итоге волновые векторы \vec{q}_l в подынтегральных выражениях остаются

только в качестве аргументов корреляционных функций, а также в знаменателях функций Грина в слагаемых типа $-i\bar{u}\bar{q}_l$. Все это дает возможность искать решение диаграммного уравнения (1.3.9) для $\tilde{M}(\bar{k}, p')$, удовлетворяющее свойству симметрии

$$\tilde{M}(\lambda\bar{k}, \lambda^\Delta p') = \lambda^\Delta \tilde{M}(\bar{k}, p'). \quad (1.3.45)$$

С учетом равенства (1.3.34) из (1.3.45) следует также, что

$$\tilde{G}(\lambda\bar{k}, \lambda^\Delta p') = \lambda^{-\Delta} \tilde{G}(\bar{k}, p'). \quad (1.3.46)$$

Для доказательства существования такого решения (и, более того, чтобы его найти) рассмотрим произвольную диаграмму n -го порядка. Сделаем в ней преобразование

$$\bar{k} \rightarrow \lambda\bar{k}, \quad p' \rightarrow \lambda^\Delta p' \quad (1.3.47)$$

с одновременной заменой переменных интегрирования

$$\bar{q}_l \rightarrow \lambda^\Delta \bar{q}_l. \quad (1.3.48)$$

Естественно, что объем интегрирования по \bar{q}_l останется прежним — это все пространство \bar{q}_l .

В результате этих операций диаграмма n -го порядка приобретет множитель $\lambda^{\Delta n}$, показатель степени в котором

$$\Delta_n = nh\Delta + n - (n-1)\Delta. \quad (1.3.49)$$

Здесь первое слагаемое справа обусловлено множителем, возникающим при этом преобразовании от корреляционных функций и всех дифференциалов $d^3\bar{q}_l$, второе слагаемое — за счет n сомножителей \bar{k} (от градиентов в крестах), третье — за счет $n-1$ функций Грина (с учетом предположения (1.3.46)). Приравнявая в (1.3.49) $\Delta_n = \Delta$, получаем уравнение, решение которого выглядит следующим образом:

$$\Delta = \frac{1}{1-h}. \quad (1.3.50)$$

Тот факт, что нашлось решение для показателя Δ , которое не зависит от порядка диаграммы, уже является доказательством свойства масштабной

Займемся теперь изучением свойств функции $\psi(\eta, \vec{m})$. Ее предел при $\eta \ll 1$ соответствует малым волновым векторам и фиксированному ненулевому значению переменной Лапласа. Разложение каждой диаграммы в этом пределе начинается с квадратичного по волновому вектору слагаемого (за счет градиентов от внешних крестов). Поэтому с учетом (1.3.54) имеем

$$\psi(\eta, \vec{m}) \sim \eta \text{ при } \eta \ll 1. \quad (1.3.55)$$

Из выражения для диаграммы второго порядка, так же как и высших порядков, видно, что точка $\vec{k} = 0$ для поляризационного оператора, а значит, и точка $\eta = 0$ для функции $\psi(\eta, \vec{m})$, является регулярной, так что при малых η имеет место разложение по целым степеням:

$$\psi(\eta, \vec{m}) = \sum_{n=1}^{\infty} d_n(\vec{m}) \eta^n \text{ при } \eta \ll 1. \quad (1.3.56)$$

С другой стороны, на примере того же выражения (1.3.52) видно, что в обратном пределе $p' = 0$, $\vec{k} \neq 0$ функция $\tilde{M}(\vec{k}, p')$ конечна и не равна нулю. Это в сочетании с равенствами (1.3.51) и (1.3.54) приводит к соотношению

$$\psi(\eta, \vec{m}) \sim \eta^{\frac{1}{2(1-h)}} \text{ при } \eta \gg 1. \quad (1.3.57)$$

Такая дробно-степенная асимптотика свидетельствует о том, что при конечном ненулевом значении η функция $\psi(\eta, \vec{m})$ имеет точку ветвления. Поскольку при действительных положительных p' и действительных k поляризационный оператор вещественен и симметричен относительно преобразования $k \rightarrow -k$, точка ветвления должна быть действительной и отрицательной, $\eta = \eta_b < 0$. Учитывая регулярный множитель $k^2 \sim \eta$, присутствующий в выражении для каждой из составляющих $\tilde{M}(\vec{k}, p')$ диаграмм, на основе (1.3.56) приходим к выводу, что функция $\psi(\eta, \vec{m})$ при $\eta \rightarrow \eta_b$ имеет структуру

$$\psi(\eta, \vec{m}) \sim \eta(\eta - \eta_b(\vec{m}))^{-\frac{1-2h}{2(1-h)}} \text{ при } |\eta - \eta_b| \ll 1. \quad (1.3.58)$$

Отсюда следует, что вблизи точки ветвления функция $\psi(\eta, \vec{m})$ стремится к бесконечности.

Отдельного рассмотрения требует случай $h = \frac{1}{2}$. Из всех диаграмм для функции $\tilde{M}(\vec{k}, p')$ здесь выделенной является диаграмма второго порядка ($n = 2$). В ней одинаково существенны все три характерные интервала интегрирования. Соответственно важна область интегрирования не только вблизи k_* , как при $h > \frac{1}{2}$, но и весь интервал от k_* до k^2/k_* . Это по сравнению со случаем $h > \frac{1}{2}$ приводит к возникновению логарифмического множителя, аргументом которого является отношение пределов интегрирования. Поэтому с учетом (1.3.44) имеем

$$\begin{aligned} \tilde{M}(\vec{k}, p') &= -\tilde{D}_{ij} k_i k_j \ln(k_*^2/k^2), \quad \tilde{D}_{ij} \sim uk_*^{-1} \\ \text{при } k \ll k_*, \quad h &= \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (1.3.59)$$

Свойства тензора \tilde{D}_{ij} совпадают со свойствами D_{ij} из (1.3.44).

Поведение концентрации. Как и ранее, нас будет интересовать распределение концентрации на временах, когда размер основной области локализации много больше первоначального размера, т. е. $R(t) \gg R(0)$. Тогда можно воспользоваться выражением (1.3.35), из которого, подставляя (1.3.34), находим:

$$\bar{c}(\vec{r}, t) = N \int_{p_* - i\infty}^{p_* + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \int \frac{d^3\vec{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{p't + i\vec{k}\vec{r}}}{p' - \tilde{M}(\vec{k}, p')}, \quad \text{Re } p_* > 0. \quad (1.3.60)$$

Напомним, что N — полное число частиц.

Структура профиля концентрации зависит от того, какому интервалу принадлежит время. Для дальнейшего анализа важно, что существенные значения переменной интегрирования p' в (1.3.60) находятся в области

$$p' \gtrsim t^{-1}. \quad (1.3.61)$$

Если принять во внимание связь между характерными значениями времени t_* и волнового вектора k_* (1.3.36) и то, что величины волнового вектора, дающие главный вклад в интеграл (1.3.60), соответствуют оценке

$$\tilde{M}(\bar{k}, p') \sim p',$$

то с учетом установленных выше свойств функции $\tilde{M}(\bar{k}, p') \sim p'$ приходим к выводу, что поведение концентрации при $t \ll t_*$ и при $t \gg t_*$ определяется поляризационным оператором при $k \gg k_*$ и при $k \ll k_*$ соответственно. Рассмотрим каждый интервал времени отдельно.

1. $t \ll t_*$. На этом интервале в соответствии с только что сказанным в равенство (1.3.60) необходимо подставить выражение для поляризационного оператора, справедливое при $k \gg k_*$. Согласно (1.3.39) оно приближенно равно поляризационному оператору в задаче без дрейфа (при $\bar{u} = 0$). Соответственно и поведение концентрации при $t \ll t_*$ совпадает с тем, что было найдено в разделе 1.1 для случая $\bar{u} = 0$.

2. $t \gg t_*$, $0,5 \leq h < 1$. Подстановка (1.3.44) в (1.3.60) и взятие интегралов приводит к выражению

$$\bar{c}(\bar{r}', t) \cong \frac{N}{\left(4\pi|\det D_{ik}|^{1/3} t\right)^{3/2}} \exp\{-\Gamma\}, \quad \Gamma = \frac{D_{ik}^{-1} r'_i r'_k}{4t},$$

$$t \gg t_*, \quad \frac{1}{2} < h < 1.$$
(1.3.62)

Оно соответствует анизотропной классической диффузии.

3. $t \gg t_*$, $0 < h < 0,5$. Подставляя (1.3.51) в выражение (1.3.60), преобразуем последнее к виду

$$\bar{c}(\bar{r}, t) = N \int_{p_* - i\infty}^{p_* + i\infty} \frac{dp'}{2\pi i} \int \frac{d^3 \bar{k}}{(2\pi)^3} \frac{e^{p't + i\bar{k}\bar{r}'}}{p'(1 + \Psi(\eta, \bar{m}))}, \quad \text{Re } p_* > 0, \quad (1.3.63)$$

где автомодельная переменная η определена равенством (1.3.54).

После перехода к безразмерным переменным интегрирования согласно

$$p' \rightarrow \bar{p}' = p't, \\ k \rightarrow \bar{k} = kR(t) \bar{p}'^{h-1},$$
(1.3.64)

$$R(t) = ut_* \left(\frac{t}{t_*} \right)^{1-h}$$
(1.3.65)

выражение (1.3.63) приобретает форму

$$\bar{c}(\vec{r}, t) = \frac{N}{R^3(t)} \Psi(\xi, \vec{n}), \quad (1.3.66)$$

где функция $\Psi(\xi, \vec{n})$ определяется выражением

$$\Psi(\xi, \vec{n}) = \int_{\bar{p}_s - i\infty}^{\bar{p}_s + i\infty} \frac{d\bar{p}'}{2\pi i} \int d\Omega_{\vec{m}} \int_0^\infty \frac{\bar{k}^2 d\bar{k}}{(2\pi)^3} \frac{\exp\{\bar{p}' + i\bar{k}\xi\bar{p}'^{1-h}(\vec{m}\vec{n})\}}{\bar{p}'^{3h-2} (1 + \Psi(\bar{k}^2, \vec{m}))}, \quad (1.3.67)$$

$$\operatorname{Re} \bar{p}_s > 0,$$

в котором

$$\xi = \frac{r'}{R(t)}, \quad \vec{n} = \frac{\vec{r}'}{r'}. \quad (1.3.68)$$

Напомним, что $\vec{r}' = \vec{r} - \vec{u}t$ — радиус-вектор в сопутствующей системе координат.

Функция $\Psi(\xi, \vec{n})$ обладает свойствами

$$\Psi(0, \vec{n}) \sim 1, \quad \Psi(\xi, \vec{n}) \Big|_{\xi \rightarrow \infty} \rightarrow 0.$$

Обратим внимание на то, что распределение концентрации является анизотропным (зависимость от вектора \vec{n} в (1.3.67)). Величина $R(t)$ определяет по порядку величины размер области локализации частиц в момент t . Показатель в зависимости $R(t) \propto t^\gamma$ равен $1-h$. Следовательно, при $h < 1/2$ $\gamma > 1/2$, и перенос примеси происходит в режиме анизотропной супердиффузии. Заметим, что поскольку $1-h < (1+h)^{-1}$, этот супердиффузионный режим менее быстрый, чем тот, что реализуется на малых временах $t < t_*$.

Проанализируем асимптотическое поведение концентрации при $\xi = r'/R(t) \gg 1$. Выполним сначала интегрирование в (1.3.67) по угловым переменным. Ниже мы убедимся, что в асимптотическом пределе концентрация экспоненциально мала. Поэтому показатель экспоненты в (1.3.67) много больше единицы. Это позволяет при угловом интегрировании применить метод стационарной фазы. Учитывая наличие двух

стационарных точек $\bar{m} = \bar{n}$ и $\bar{m} = -\bar{n}$, а также свойство симметрии $\Psi(\bar{k}^2, -\bar{m}) = \Psi(\bar{k}^2, \bar{m})$, получаем из (1.3.67) с помощью этого метода:

$$\Psi(\xi, \bar{n}) = \frac{1}{\xi} \int_{\bar{p}_* - i\infty}^{\bar{p}_* + i\infty} \frac{d\bar{p}'}{2\pi i} \bar{p}'^{1-2h} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\bar{k}d\bar{k}}{(2\pi)^2 i} \frac{\exp\{\bar{p}' + i\bar{k}\xi\bar{p}'^{1-h}\}}{1 + \Psi(\bar{k}^2, \bar{n})}, \quad (1.3.69)$$

$$\operatorname{Re} \bar{p}_* > 0.$$

Рассмотрим действительные $\eta = \bar{k}^2$. Функция $\Psi(\eta, \bar{n})$ тогда тоже действительна, причем ее знак совпадает со знаком η . Учитывая, что при положительных η она не обращается в нуль (напомним, это следует из условия устойчивости решения, см. (1.1.16)) и что вблизи точки ветвления $\eta = \eta_b$ ($\eta_b < 0$) она стремится к минус бесконечности, приходим к выводу, что знаменатель подынтегрального выражения в (1.3.69) $1 + \Psi(\bar{k}^2, \bar{n})$ обращается в нуль при $\bar{k}_0 = \pm i\sqrt{|\eta_0(\bar{n})|}$, где $\eta_0 < 0$ и $|\eta_0| < |\eta_b|$. Таким образом, лежащая на мнимой оси точка \bar{k}_0 является полюсом подынтегрального выражения в (1.3.69). Если при этом между $i\sqrt{|\eta_b|}$ и действительной осью не один полюс, выберем ближайший к действительной оси. Он и определяет асимптотику интеграла при $\xi \gg 1$. Сдвигая контур интегрирования по переменной \bar{k} в верхнюю полуплоскость, как показано на **рис. 1.1.1** в разделе 1.1, получаем

$$\Psi(\xi, \bar{n}) \cong \frac{1}{4\pi\Psi'_0(\bar{n})\xi} \int_{\bar{p}_* - i\infty}^{\bar{p}_* + i\infty} \frac{d\bar{p}'}{2\pi i} \bar{p}'^{1-2h} \exp\{-\Gamma(\bar{p}')\}, \quad (1.3.70)$$

$$\operatorname{Re} \bar{p}_* > 0.$$

Здесь введены обозначения:

$$\Gamma(\bar{p}') = \bar{p}'^{1-h} \frac{\varepsilon(\bar{n})}{1-h} - \bar{p}', \quad \varepsilon(\bar{n}) = (1-h)\sqrt{|\eta_0(\bar{n})|}\xi, \quad (1.3.71)$$

$$\Psi'_0(\bar{n}) = \left. \frac{\partial\Psi}{\partial\eta} \right|_{\eta=\eta_0}.$$

Наконец, вычисляя оставшийся интеграл по переменной \bar{p}' методом перевала (см. [8; 9]), приходим к выражению

$$\Psi(\xi, \bar{n}) \cong \frac{1}{(4\pi)^{3/2} \psi'_0 \xi} \sqrt{\frac{2}{|\Gamma''_0|}} \bar{p}'_0{}^{1-2h} \exp\{-\Gamma\}. \quad (1.3.72)$$

Здесь \bar{p}'_0 — точка перевала, определяемая уравнением

$$\left. \frac{d\Gamma(\bar{p}')}{d\bar{p}'} \right|_{\bar{p}'=\bar{p}'_0} = 0. \quad (1.3.73)$$

Другие обозначения, использованные в (1.3.72):

$$\Gamma = \Gamma(\bar{p}'), \Gamma''_0 = \left. \frac{d^2\Gamma(\bar{p}')}{d\bar{p}'^2} \right|_{\bar{p}'=\bar{p}'_0}. \quad (1.3.74)$$

Решение уравнения (1.3.73) с учетом (1.3.71) дает

$$\bar{p}'_0 = \varepsilon^{1/h}(\bar{n}). \quad (1.3.75)$$

Раскрывая с помощью (1.3.75) равенства (1.3.74), подставляя затем их в (1.3.70), а после этого результат — в (1.3.66), находим асимптотику концентрации при $\xi \gg 1$:

$$\bar{c}(\bar{r}, t) \cong N \frac{A(\bar{n})}{[4\pi R^2(t)]^{3/2}} [\varepsilon(\bar{n})]^{3(1-2h)/2h} \exp\{-\Gamma\}, \quad (1.3.76)$$

$$\Gamma = \frac{h}{1-h} [\varepsilon(\bar{n})]^{1/h}, \quad A(\bar{n}) = \frac{1-h}{\psi'_0(\bar{n})} \sqrt{\frac{2|\eta_0(\bar{n})|}{h}}.$$

Здесь $R(t)$ определен формулой (1.3.65).

4. $t \gg t_*$, $h=1$. Выражение для концентрации получается подстановкой (1.3.59) в соотношение (1.3.60) и выполнения соответствующих интегрирований:

$$\bar{c}(\bar{r}', t) \cong \frac{1}{\left(4\pi \left| \det \tilde{D}_{ik} \right|^{1/3} t \ln \frac{t}{t_*} \right)^{3/2}} \exp\{-\Gamma\}, \quad (1.3.77)$$

$$\Gamma = \frac{\tilde{D}_{ik}^{-1} r'_i r'_k}{4t \ln \frac{t}{t_*}}, \quad t \gg t_*, \quad h = \frac{1}{2}.$$

Основные итоги этого раздела состоят в следующем.

При наличии дрейфа со средней скоростью \bar{u} в модели случайной адвекции возникает характерное время t_* , при котором в случае $h < 1$ происходит смена режимов переноса. В интервале ранних времен $t < t_*$ перенос идет в режиме супердиффузии, свойственном рассматриваемой модели в отсутствие дрейфа. На поздних временах $t > t_*$ тип режима зависит от значения масштабной размерности h . При $0 < h < 1/2$ он соответствует супердиффузии (менее быстрой, чем при $t < t_*$), при $1/2 < h < 1$ — классической диффузии, а при $h = 1/2$ — логарифмически модифицированной классической диффузии. Все режимы, реализующиеся при $t > t_*$, являются анизотропными. На **рис. 1.3.1** схематически изображена зависимость размера области локализации примеси от времени при наличии дрейфа.

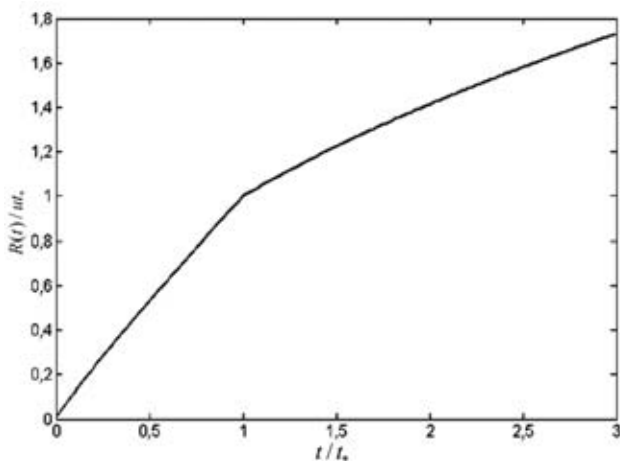


Рис. 1.3.1. Зависимость размера области локализации от времени при наличии дрейфа (схема)

В [8—10] было установлено, что следствием смены режимов переноса во времени является многоступенчатая структура асимптотик концентрации (концентрационных хвостов). На умеренно далеких расстояниях асимптотика определяется текущим режимом, а на более далеких — режимом, отвечающим более ранним временам. Применительно к задаче настоящего раздела хвосты концентрации на временах $t > t_*$ состоят из двух участков. Ближний участок определяется выражениями (1.3.62), (1.3.76) и (1.3.77). Эти формулы согласно [10—12] применимы на расстояниях, отвечающих

неравенству $\Gamma < t/t_*$. На более далеких расстояниях, когда $\Gamma > t/t_*$, концентрация описывается асимптотикой, соответствующей временам $t < t_*$, и, следовательно, совпадает с вычисленной в разделе 1.1 (см. (1.1.56) и (1.1.57)).

1.4. Диффузия в регулярно-неоднородной среде: задача Дыхне

В настоящем разделе анализируется перенос примеси в регулярно-неоднородной системе, состоящей из среды с высокой проницаемостью, занимающей область I , ограниченную в одном или двух измерениях, и среды с низкой проницаемостью, заполняющей оставшуюся часть пространства (область II). В качестве физического механизма переноса частиц рассматривается классическая диффузия. Модель была впервые сформулирована академиком А. М. Дыхне, и мы называем ее в его честь задачей Дыхне. Применительно к переносу примеси в геологических породах модель учитывает один из принципиальных аспектов этих сред — резкий контраст в распределении свойств. В этом смысле можно говорить, что среда в области I имитирует трещину, а область II соответствует матрице скальной породы.

В подразделе 1.4.1 дана постановка задачи, в подразделе 1.4.2 — качественный вывод основных соотношений, в подразделе 1.4.3 получены количественные результаты для модели с одиночной трещиной, подраздел 1.4.4 посвящен анализу задачи о системе трещин.

1.4.1. Постановка задачи

В области I концентрация частиц $c(\vec{r}, t)$ удовлетворяет классическому уравнению диффузии

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D\Delta c, \quad (1.4.1)$$

где D — коэффициент диффузии в сильнопроницаемой среде. Уравнение для концентрации в области II получается из (1.4.1) заменой D на коэффициент диффузии слабопроницаемой среды d . Между ними существует соотношение

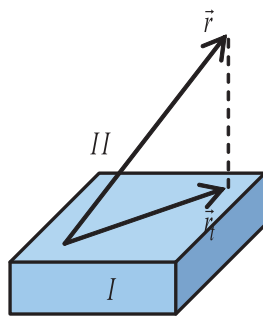
$$D \gg d. \quad (1.4.2)$$

Как обычно, на границе двух сред непрерывными являются концентрация и нормальная компонента плотности потока. Мы полагаем, что в начальный момент все частицы сосредоточены внутри области I .

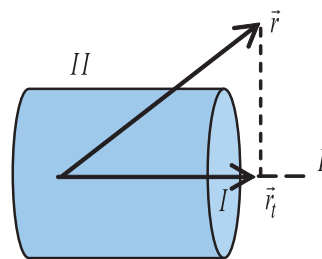
Для случая, когда область I односвязная (одионочная трещина), будем рассматривать два варианта геометрии, различающиеся числом измерений l , по которым эта область ограничена (**рис. 1.4.1**):

$l = 1$ — плоскопараллельный слой толщиной a ;

$l = 2$ — прямой цилиндр (не обязательно круглый) с площадью поперечного сечения $S \sim a^2$.



$l=1$



$l=2$

Рис. 1.4.1. Геометрия задачи

Задача состоит в том, чтобы выяснить зависимость дисперсии примеси $\sigma(t)$ в области I от времени. Величину $\sigma(t)$ определим равенством

$$\sigma(t) \equiv \langle \vec{r}_i^2 \rangle = \left(\int_{(I)} d^3 r c(\vec{r}, t) \right)^{-1} \int_{(I)} d^3 r \vec{r}_i^2 c(\vec{r}, t), \quad (1.4.3)$$

где \vec{r}_i — $(3-l)$ -мерный радиус-вектор (l — количество направлений, по которым область I ограничена). При $l=1$ \vec{r}_i есть проекция трехмерного радиуса-вектора \vec{r} на плоскую границу раздела двух сред, а при $l=2$ — проекция вектора \vec{r} на ось прямого цилиндра. Интегрирование в (1.4.3) происходит по области I . Здесь и далее предполагается, что начало координат выбрано так, чтобы выполнялось условие

$$\int_{(I)} d^3 r \vec{r}_i c(\vec{r}, 0) = 0. \quad (1.4.4)$$

Отметим, что характер зависимости $\sigma(t)$ определяет режим переноса примеси. На временах, когда размер области локализации в I $R(t)$ велик по сравнению с первоначальным размером $R_0 = R(0)$, выполняется очевидное соотношение, вытекающее из определения дисперсии (1.4.3):

$$R(t) \sim \sqrt{\sigma(t)}. \quad (1.4.5)$$

1.4.2. Качественный анализ

Так как за время t частицы в области I диффундируют на расстояние $\sim \sqrt{4Dt}$, то на временах $t \ll t_0$, где

$$t_0 = a^2 / 4D, \quad (1.4.6)$$

частицы не выходят за пределы этой области. Диффузия тогда происходит так, как если бы область I занимала все бесконечное пространство и являлась трехмерной.

На временах $t \gg t_0$ распределение концентрации в I становится однородным по одному (для плоскопараллельного слоя) или двум (для цилиндра) направлениям, по которым область ограничена. Если при этом длина диффузии в слабопроницаемой среде мала по сравнению с a , т. е. $t \ll t_1$, где

$$t_1 = a^2 / 4d, \quad (1.4.7)$$

то большую часть времени частицы проводят внутри области I , так что при этом мы имеем дело с квазидвумерной (при $l=1$) или квазиодномерной

(при $l = 2$) диффузией. Дисперсия при этом определяется известным выражением

$$\sigma(t) = 2(3-l)Dt. \quad (1.4.8)$$

Ситуация существенно меняется на временах $t \gg t_1$, когда доля времени τ из интервала t , проводимая частицей в среде I , становится много меньше единицы. До тех пор пока $\sigma(t)$ растет главным образом благодаря диффузии в среде I (время окончания этого режима будет определено ниже), можно считать, что частицы распространяются по направлениям, вдоль которых среда I бесконечна, только в эти отрезки времени ($\sim t\tau$). По порядку величины τ можно оценить как отношение объемов, занятых частицами в областях I и II :

$$\tau(t) \sim (a/\sqrt{dt})'. \quad (1.4.9)$$

Оценку для дисперсии будем искать по формуле

$$\sigma(t) \sim D \int_{t_1}^t \tau(t') dt'. \quad (1.4.10)$$

Подставляя (1.4.10) в (1.4.9), находим:

$$\sigma(t) \sim D\sqrt{tt_1} \text{ при } l=1, \quad (1.4.11)$$

$$\sigma(t) \sim Dt_1 \ln \frac{t}{t_1} \text{ при } l=2. \quad (1.4.12)$$

Эти соотношения остаются справедливыми до тех пор, пока дисперсия за счет диффузии в слабопроницаемой среде ($\sim dt$) остается малой по сравнению дисперсией в среде I . Приравнивание этих величин дает оценку верхних границ t_2 для режимов переноса, определяемых зависимостями (1.4.11) и (1.4.12):

$$t_2 \sim t_1 \left(\frac{D}{d} \right)^2 \text{ при } l=1, \quad (1.4.13)$$

$$t_2 \sim t_1 \frac{D}{d} \ln \frac{D}{d} \text{ при } l=2. \quad (1.4.14)$$

При $t \gg t_2$ доля времени, проводимая частицами в области I , столь мала, что дисперсия определяется диффузией в слабопроницаемой среде. Тогда имеем:

$$\sigma(t) \cong 2(3-l)dt. \quad (1.4.15)$$

1.4.3. Одиночная трещина. Количественный анализ

При выводе результатов, относящихся к временам $t \gg t_0$, когда концентрация в области I однородна по ее поперечному сечению, удобно перейти к представлению Фурье по координате \vec{r}_l и представлению Лапласа по времени:

$$c_{\vec{k}p} = \int_0^\infty dt \int d^{(3-l)}\vec{r}_l c(\vec{r}, t) \exp(-i\vec{k}\vec{r}_l - pt). \quad (1.4.16)$$

Выраженная через это представление дисперсия частиц (1.4.3) имеет вид

$$\sigma(t) = - \left[\int_{p_*-i\infty}^{p_*+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} c_{0p} \right]^{-1} \int_{p_*-i\infty}^{p_*+i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \nabla_{\vec{k}}^2 c_{\vec{k}p} \Big|_{\vec{k}=0}, \quad \text{Re } p_* > 0. \quad (1.4.17)$$

Здесь, как и в (1.4.16), концентрация частиц относится к области I .

Проинтегрировав уравнение (1.4.1) по l координатам внутри области I (по ее поперечному сечению) и перейдя в представления Фурье по координате \vec{r}_l и Лапласа по времени, придем к равенству

$$(p + Dk^2) S c_{\vec{k}p} + q_{\vec{k}p} = N, \quad (1.4.18)$$

где N — полное число частиц; S — площадь поперечного сечения области I ($S = a$ при $l = 1$ и $S \sim a^2$ при $l = 2$); $q_{\vec{k}p}$ — компонента Фурье — Лапласа плотности потока частиц из области I в область II через границу между ними. Предполагается, что абсолютная величина вектора \vec{k} удовлетворяет неравенству

$$kR_0 \ll 1, \quad (1.4.19)$$

где R_0 — размер области локализации частиц по координате \vec{r}_l в начальный момент времени.

Чтобы замкнуть задачу о среде I , необходимо установить связь между величинами $q_{\bar{k}p}$ и $c_{\bar{k}p}$. Для этого воспользуемся уравнением диффузии в области II , учтя граничные условия непрерывности концентрации и плотности потока. Отдельно рассмотрим случаи $l = 1$ и $l = 2$.

1. $l = 1$. Уравнение диффузии в $\bar{k}p$ -представлении для концентрации частиц в области II $c_{\bar{k}p}(z)$ имеет вид

$$\left(p + dk^2 - d \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) c_{\bar{k}p}(z) = 0, \quad (1.4.20)$$

где z — координата по нормали к плоскопараллельному слою. Решение уравнения (1.4.20) для положительных значений координаты z имеет вид

$$c_{\bar{k}p}(z) = c_{\bar{k}p} \exp \left\{ -z \sqrt{k^2 + p/d} \right\}. \quad (1.4.21)$$

В этой формуле начало отсчета координаты z выбрано на границе между областями I и II и учтено граничное условие

$$c_{\bar{k}p}(0) = c_{\bar{k}p}. \quad (1.4.22)$$

Учитывая наличие двух равноценных частей границы ($z = 0$ и $z = -a$), для суммарной плотности потока имеем из (1.4.21):

$$q_{\bar{k}p} = -2d \left. \frac{\partial c_{\bar{k}p}(z)}{\partial z} \right|_{z=0} = 2d \sqrt{k^2 + p/d} c_{\bar{k}p}. \quad (1.4.23)$$

Выражая с помощью этой зависимости $q_{\bar{k}p}$ через $c_{\bar{k}p}$ в уравнении (1.4.18), находим компоненту Фурье — Лапласа концентрации частиц в области I :

$$c_{\bar{k}p} = \frac{N/S}{p + Dk^2 + \sqrt{\frac{p + dk^2}{t_1}}}, \quad (1.4.24)$$

где t_1 — характерное время, определенное формулой (1.4.7).

Подстановка (1.4.24) в (1.4.17) дает

$$\sigma(t) = 2 \left[\int_{p_* - i\infty}^{p_* + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{1}{p + \sqrt{\frac{p}{t_1}}} \right]^{-1} \int_{p_* - i\infty}^{p_* + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \frac{2D + \frac{d}{\sqrt{pt_1}}}{\left(p + \sqrt{\frac{p}{t_1}} \right)^2}, \quad \text{Re } p_* > 0. \quad (1.4.25)$$

Отсюда после интегрирования получается выражение для дисперсии на временах, больших по сравнению с t_1 :

$$\begin{aligned} \sigma(t) &= 4Dt \quad \text{при } t_0 \ll t \ll t_1, \\ \sigma(t) &= 4\left(D\sqrt{\pi t t_1} + dt\right) \quad \text{при } t \gg t_1. \end{aligned} \quad (1.4.26)$$

2. $l = 2$. В представлении Фурье—Лапласа уравнение диффузии в области Π имеет вид

$$\left(p + dk^2 - d\Delta_{\vec{\rho}} \right) c_{\vec{k}\rho}(\vec{\rho}) = 0, \quad (1.4.27)$$

где $\vec{\rho}$ — двумерная координата в плоскости, нормальной к оси прямого цилиндра.

Фурье—Лаплас-компонента отнесенного к единице длины потока $q_{\vec{k}\rho}$ дается интегралом по контуру поперечного сечения цилиндра U :

$$q_{\vec{k}\rho} = -d \oint_U du \left(\vec{s} \nabla_{\vec{\rho}} \right) c_{\vec{k}\rho}(\vec{\rho}). \quad (1.4.28)$$

Здесь du — элемент длины контура; \vec{s} — единичный вектор внешней нормали к линии контура в плоскости поперечного сечения.

Как и при выводе формулы (1.4.26), будем рассматривать времена $t \gg t_1$. Поскольку главный вклад во встречающиеся далее интегралы обратного преобразования Лапласа дает область $p \sim t^{-1}$, имеет место неравенство

$$pt_1 \ll 1. \quad (1.4.29)$$

Время t_1 определено формулой (1.4.7). Поскольку $a \sim \sqrt{S}$, определим его для $l = 2$ как $a = \sqrt{S/\pi}$. Тогда имеем

$$t_1 = \frac{S}{\pi d}. \quad (1.4.30)$$

Для дальнейшего вывода удобно ввести в плоскости поперечного сечения окружность O радиуса ρ_0 , охватывающую цилиндр так, чтобы площадь соответствующего круга была минимальной (рис. 1.4.2). Очевидно,

$$\rho_0 \sim \sqrt{\frac{S}{\pi}}. \quad (1.4.31)$$

Далее проинтегрируем уравнение (1.4.27) по переменной $\bar{\rho}$ по области между контуром поперечного сечения цилиндра и окружностью O .

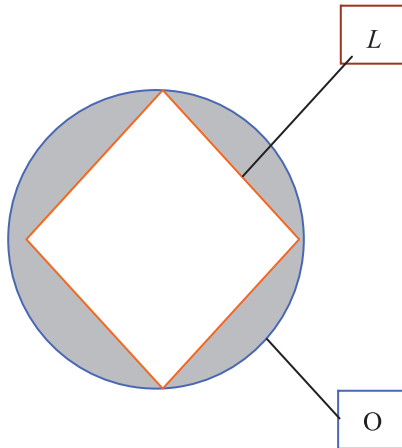


Рис. 1.4.2. Площадь интегрирования (закрашенная) уравнения (1.4.27) при выводе формулы (1.4.32)

Благодаря неравенству (1.4.29) с учетом (1.4.31) вкладом двух первых слагаемых в интеграл от уравнения (1.4.27) можно пренебречь. Тогда, используя теорему Гаусса, получим

$$q_{\bar{\rho}} \cong -d\rho_0 \int_0^{2\pi} d\phi \left. \frac{\partial c_{\bar{k}\rho}(\bar{\rho})}{\partial \rho} \right|_{\rho=\rho_0}. \quad (1.4.32)$$

Функция $c_{\bar{k}\rho}(\bar{\rho})$ может быть разложена в ряд по собственным функциям уравнения (1.4.27), которые имеют вид

$$K_m \left(\rho \sqrt{k^2 + p/d} \right) \exp(\pm im\phi),$$

где K_m — функция Макдональда (см. [11]); ϕ — азимутальный угол в плоскости поперечного сечения. После подстановки ряда в интеграл (1.4.32) от ряда останется лишь член с $m = 0$, который в силу граничного условия непрерывности концентрации имеет вид

$$c_{\bar{k}p}^{(1)}(\bar{\rho}) = c_{\bar{k}p} \frac{K_0\left(\rho\sqrt{k^2 + p/d}\right)}{K_0\left(\rho_0\sqrt{k^2 + p/d}\right)} \quad (1.4.33)$$

с предельным видом функции Макдональда нулевого порядка [11] при малых значениях аргумента

$$K_0(u) \cong -\ln u \text{ при } u \ll 1.$$

После подстановки получившегося выражения в (1.4.32) находим плотность потока частиц через границу между областями I и II:

$$q_{\bar{k}p} \cong -\frac{2\pi d c_{\bar{k}p}}{\ln\left(\rho_0\sqrt{k^2 + p/d}\right)}. \quad (1.4.34)$$

Здесь и далее для случая $l = 2$ подразумевается логарифмическая точность. Иными словами, аргумент логарифма определен с точностью до численного множителя порядка единицы. Исключив с помощью (1.4.34) величину $q_{\bar{k}p}$ из (1.4.18) и снова воспользовавшись неравенством (1.4.29), приходим к выражению для концентрации в области I:

$$c_{\bar{k}p} = \frac{N/S}{Dk^2 + \frac{4}{t_1} \ln^{-1}\left(\frac{1}{\rho_0^2 k^2 + pt_1}\right)}. \quad (1.4.35)$$

Подстановка этой формулы в (1.4.17) дает

$$\sigma(t) = -\frac{\int_{p_* - i\infty}^{p_* + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp(pt) \left\{ \frac{Dt_1}{2} \ln^2(pt_1) + \frac{2d}{p} \right\}}{\int_{p_* - i\infty}^{p_* + i\infty} \frac{dp}{2\pi i} \exp(pt) \ln(pt_1)}, \quad \text{Re } p_* > 0. \quad (1.4.36)$$

Вычисление интегралов приводит к окончательному выражению для дисперсии, справедливому на больших по сравнению с t_1 временах:

$$\sigma(t) = Dt_1 \ln \frac{t}{t_1} + 2dt \text{ при } t \gg t_1. \quad (1.4.37)$$

В интервалах времени $t_1 \ll t \ll t_2$ и $t \gg t_2$, где t_2 определено в (1.4.13) и (1.4.14), формулы (1.4.26) и (1.4.36) подтверждают оценки дисперсии (1.4.11), (1.4.12), полученные качественными оценками. Сами же формулы (1.4.26) и (1.4.36) остаются справедливыми и в переходной области, т. е. при $t \sim t_2$.

Учитывая (1.4.5), формулам (1.4.11) и (1.4.12) можно придать вид

$$R(t) \propto t^{l/4}, \quad l=1$$

$$R(t) \propto \ln^{1/2} \left(\frac{t}{t_1} \right), \quad l=2 \text{ при } t_1 \ll t \ll t_2. \quad (1.4.38)$$

Таким образом, в задаче Дыхне имеет место промежуточный интервал времени $t_1 \ll t \ll t_2$, в котором перенос примеси является неклассическим. В обоих вариантах геометрии области I (плоскопараллельного слоя или прямого цилиндра) он соответствует субдиффузии. При $l=1$ это степенная субдиффузия, а при $l=2$ логарифмическая. В этом интервале показатель в зависимости $R(t) \propto t^\gamma$ принимает следующие значения:

$$\gamma = 1/4 \text{ при } l=1,$$

$$\gamma \rightarrow 0 \text{ при } l=2.$$

С учетом поведения концентрации при $t \ll t_1$ легко подобрать интерполяционные формулы, описывающие поведение дисперсии при $t \gg t_0$:

$$\sigma(t) = 2\pi Dt_1 \left(\sqrt{1 + \frac{4t}{\pi t_1}} - 1 \right) + 4dt \text{ при } l=1,$$

$$\sigma(t) = 2Dt_1 \ln \left(1 + \frac{t}{t_1} \right) + 2dt \text{ при } l=2. \quad (1.4.39)$$

Зависимость дисперсии от времени, описываемая формулами (1.4.39), изображена на **рис. 1.4.3**.

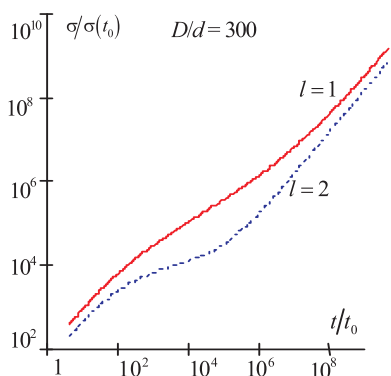


Рис. 1.4.3. Зависимость дисперсии от времени в задаче Дыхне об одиночной трещине

Картина смены режимов переноса может быть еще более сложной, если область I имеет форму прямого цилиндра с сильноанизотропным сечением. Например, если сечение — прямоугольник со сторонами a и b , удовлетворяющими условию

$$a\sqrt{\frac{d}{D}} \ll b \ll a,$$

имеют место следующие режимы:

- $t_0 \ll t \ll t_{1b}$:

$R(t) \sim \sqrt{Dt}$ — быстрая классическая диффузия;

- $t_{1b} \ll t \ll t_{1a}$:

$R(t) \sim (D\sqrt{tt_b})^{1/4}$ — степенная субдиффузия с показателем $\gamma = 1/4$;

- $t_{1a} \ll t \ll t_{2a}$:

$R(t) = \left(D\sqrt{t_a t_b} \ln \frac{t}{t_a} \right)^{1/2}$ — логарифмическая субдиффузия;

- $t \gg t_{2a}$:

$R(t) \sim \sqrt{dt}$ — медленная классическая диффузия.

Здесь использованы обозначения:

$$t_{1a} = \frac{a^2}{4d}, \quad t_{1b} = \frac{b^2}{4d}, \quad t_{2a} = t_{1a} (D/a) \ln(D/a).$$

В реальных ситуациях отношение коэффициентов диффузии двух сред D/d может быть достаточно большим, чтобы время t_2 оказалось практически недостижимым, и тогда субдиффузия будет играть роль асимптотического режима, как это происходит в нерегулярных средах.

Отметим, что модель Дыхне в отношении систематики режимов переноса напоминает гребешковую модель, исследовавшуюся в [12; 13]. Однако различие между ними состоит в том, что в гребешковой модели для слабопроницаемой среды отсутствует возможность переноса в продольных направлениях (по которым сильнопроницаемая среда бесконечна). Из-за этого режим переноса, отвечающий самым поздним временам, в модели Дыхне определяется матрицей (слабопроницаемой средой), а в гребешковой модели — нет.

1.4.4. Системы трещин

Рассмотрим вариант задачи Дыхне, в которой сильнопроницаемая среда занимает многосвязную область I и соответствует периодической системе M параллельных друг другу одинаковых плоскопараллельных слоев ($l=1$) либо прямых цилиндров ($l=2$) (для краткости и те и другие будем называть трещинами). Как и ранее, толщину слоя будем обозначать a , площадь поперечного сечения цилиндра — $S \sim a^2$. Расстояние между трещинами b считается большим в сравнении с их поперечным размером:

$$b \gg a. \quad (1.4.40)$$

Как и прежде, будем полагать, что примесь изначально сосредоточена в одной из трещин. Назовем ее основной и выберем в ней начало координат, причем так, чтобы выполнялось условие (1.4.4). Дисперсия по-прежнему определена равенством (1.4.3), в котором интегрирование происходит по объему основной трещины. Анализ проведем на качественном уровне.

Оценку для дисперсии будем искать по формуле

$$\sigma(t) \sim \int_0^t D_{\text{ef}}(t') dt', \quad (1.4.41)$$

где $D_{\text{ef}}(t)$ — средневзвешенное значение коэффициента диффузии по области локализации примеси в момент времени t :

$$D_{\text{ef}}(t) \sim \frac{DA_I(t) + dA_{II}(t)}{A_I(t) + A_{II}(t)}. \quad (1.4.42)$$

Здесь D и d — коэффициенты диффузии соответственно сильно- и слабопроницаемой среды; $A_I(t)$ и $A_{II}(t)$ — парциальные объемы, приходящиеся соответственно на сильно- и слабопроницаемую среды в области локализации примеси на момент t в пространстве l измерений, по которым сильнопроницаемая среда имеет ограничения.

Для рассмотренного в предыдущих разделах случая одиночной трещины при $t \gg t_0$ имеем

$$\begin{aligned} A_I &= a, \quad A_{II} \sim \sqrt{4dt} \quad \text{при } l=1 \quad (M=1), \\ A_I &= S, \quad A_{II} \sim 4dt \quad \text{при } l=2 \end{aligned} \quad (1.4.43)$$

Легко проверить, что подстановка (1.4.43) в (1.4.42), а затем (1.4.42) в (1.4.41) дает все результаты подраздела 1.4.2 для одиночной трещины. При этом условная граница между режимами быстрой классической диффузии и субдиффузии t_1 соответствует моменту, когда второе слагаемое в знаменателе формулы (1.4.42) сравнивается с первым; при этом второе слагаемое в числителе (1.4.42) остается много меньше первого. Граница же между режимами субдиффузии и медленной классической диффузии t_2 соответствует моменту, когда вклад в интеграл (1.4.41), возникающий от второго слагаемого в числителе (1.4.42), сравнивается с вкладом от первого. Отметим, что из-за выполнения неравенства (1.4.40) величина $A_{II}(t)$ определяется (1.4.43) независимо от количества трещин.

При переходе от одиночной трещины к системе трещин существенны два соображения. Первое: поскольку диффузия по слабопроницаемой среде между основной и ближайшей к ней трещиной занимает время

$$t_b = \frac{b^2}{4d}, \quad (1.4.44)$$

то на временах $t \ll t_b$ присутствие всех остальных (помимо основной) трещин на переносе не сказывается. Второе соображение: в задаче об одиночной трещине на временах $t \gg t_2$ (t_2 определено формулами (1.4.13) и (1.4.14)) величина дисперсии определяется исключительно слабопроницаемой средой. Сопоставляя их, приходим к выводу, что при $t_b \gg t_2$ дисперсия частиц в задачах о системе трещин совпадает с найденной в предыдущих разделах соответствующей дисперсией в случае единственной трещины. Иначе говоря, при выполнении неравенства $t_b \gg t_2$ присутствие всех других трещин, кроме основной, на переносе примеси не

сказывается. Поэтому далее, рассматривая случай $M \geq 2$, будем считать, что выполняется обратное неравенство

$$t_b \ll t_2. \quad (1.4.45)$$

Начнем со случая двух трещин.

1. $M = 2$. Заметим, что благодаря (1.4.40), для t_b и t_1 (см. (1.4.7)) справедливо неравенство

$$t_1 \ll t_b. \quad (1.4.46)$$

Поэтому при $t \ll t_1$ перенос идет в режиме быстрой классической диффузии, а в интервале между t_1 и t_b реализуется режим субдиффузии, соответствующий одиночной трещине:

$$\sigma^{(2)}(t) = \sigma(t) \text{ при } t_1 \ll t \ll t_b. \quad (1.4.47)$$

Здесь и далее номер в верхнем индексе обозначает количество трещин, к которому относится рассматриваемый случай. Величины без верхнего индекса относятся к одиночной трещине. Так, $\sigma(t)$ есть дисперсия в задаче об одиночной трещине (см. (1.4.11) и (1.4.12)).

На временах $t \sim t_b$ в процесс переноса вовлекается вторая трещина, и дисперсия приобретает дополнительный коэффициент 2:

$$\sigma^{(2)}(t) = 2\sigma(t) \text{ при } t_b \ll t \ll t_2. \quad (1.4.48)$$

На временах $t \gg t_2$ перенос идет в режиме медленной классической диффузии с дисперсией, определенной формулой (1.4.15).

Перейдем к рассмотрению задачи о переносе в регулярно-неоднородной среде с большим количеством трещин ($M \gg 1$). На временах $t \leq t_b$ помимо основной трещины в процессе переноса участвуют только соседние с ней. Поэтому качественно дисперсия протекает так же, как на соответствующих временах в рассмотренном только что случае двух трещин. Следовательно, далее можно сосредоточиться на временах $t \gg t_b$. Анализ удобно вести отдельно для системы плоскопараллельных пластин ($l = 1$) и прямых цилиндров ($l = 2$).

2. $M \gg 1$, $t \gg t_b$, $l = 1$. Парциальный объем сильнопроницаемой среды при $t \gg t_b$ можно записать в виде

$$A_l(t) = am(t), \quad (1.4.49)$$

где $m(t)$ — количество трещин, вовлеченных в процесс переноса к моменту t . Далее для краткости будем называть $m(t)$ числом активных трещин. Подставляя (1.4.49) в (1.4.42), а затем (1.4.42) в (1.4.41), получаем выражение для дисперсии при $t \gg t_b$:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \int \left(\frac{Dam(t')}{\sqrt{4dt}} + d \right) dt'. \quad (1.4.50)$$

Число активных трещин дается очевидными оценками

$$\begin{aligned} m(t) &\sim \frac{\sqrt{4dt}}{b} \quad \text{при } t < M^2 t_b, \\ m(t) &= M \quad \text{при } t > M^2 t_b. \end{aligned} \quad (1.4.51)$$

После подстановки (1.4.51) в (1.4.50) приходим к заключению о наличии трех последовательно сменяющих друг друга режимов переноса примеси. В каком режиме протекает процесс, зависит от того, какой из членов в скобках под интегралом в (1.4.50) доминирует и каким из выражений (1.4.51) определяется величина $m(t)$.

Первый режим реализуется, когда число активных трещин растет, оставаясь меньше максимального значения M :

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \left(\frac{a}{b} \right) Dt \quad \text{при } t_b \ll t \ll M^2 t_b. \quad (1.4.52)$$

Это режим ослабленной классической диффузии с эффективным коэффициентом $D_{\text{ef}} = (a/b)D$, удовлетворяющим неравенству

$$d \ll D_{\text{ef}} \ll D. \quad (1.4.53)$$

Второй режим протекает, когда число активных трещин достигло максимального, а вклад слабопроницаемой среды в величину дисперсии (см. второе слагаемое в скобках в (1.4.50)) по-прежнему остается пренебрежимо малым:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim MD\sqrt{tt_1} \quad \text{при } M^2 t_b \ll t \ll M^2 t_2. \quad (1.4.54)$$

Этот режим соответствует усиленной (множитель M) степенной субдиффузии.

Наконец, третий, самый поздний режим наступает, когда вклад слабопроницаемой среды становится преобладающим:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim dt \text{ при } t \gg M^2 t_2. \quad (1.4.55)$$

Это режим медленной классической диффузии.

3. $M \gg 1$, $t \gg t_b$, $l = 2$. В связи с тем, что при $l = 2$ теперь $A_{II} \sim 4dt$, формула для дисперсии (1.4.50) модифицируется следующим образом:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \int \left(\frac{DSm(t')}{4dt} + d \right) dt'. \quad (1.4.56)$$

Рассмотрим отдельно две конфигурации периодической системы M параллельных друг другу цилиндрических трещин. Первая из них соответствует линейной цепочке цилиндров, когда их оси лежат в одной плоскости, а вторая — объемной периодической системе цилиндрических трещин.

Плоская периодическая цепочка M трещин (рис. 1.4.4).



Рис. 1.4.4. Поперечное сечение плоской системы цилиндрических трещин

Число активных трещин для этой конфигурации, как и в случае $l = 1$, описывается (1.4.51). Подставляя (1.4.51) в (1.4.56) и действуя, как при $l = 1$, находим режимы переноса. Их систематика зависит от соотношения между двумя характерными временами t_2 и Mt_b .

Если

$$t_2 \gg Mt_b, \quad (1.4.57)$$

реализуются три режима.

Сначала это ослабленный (множитель \sqrt{S}/b) степенной субдиффузионный режим:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \frac{\sqrt{S}}{b} D \sqrt{tt_1} \text{ при } t_b \ll t \ll M^2 t_b, \quad (1.4.58)$$

затем усиленный (множитель M) логарифмический субдиффузионный режим:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim MDt_1 \ln \frac{t}{t_b} \text{ при } M^2 t_b \ll t \ll Mt_2 \quad (1.4.59)$$

и, наконец, режим медленной классической диффузии:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim dt \text{ при } t \gg Mt_2. \quad (1.4.60)$$

Если же, наоборот,

$$t_2 \ll Mt_b, \quad (1.4.61)$$

то при $t > t_b$ режимов всего два — ослабленный степенной (субдиффузионный) и режим медленной классической диффузии:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \frac{\sqrt{S}}{b} D \sqrt{tt_1} \text{ при } t_b \ll t \ll t_2^2 / t_b, \quad (1.4.62)$$

$$\sigma^{(M)}(t) \sim dt \text{ при } t \gg t_2^2 / t_b. \quad (1.4.63)$$

Объемная периодическая система M трещин (рис. 1.4.5).

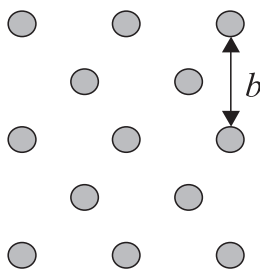


Рис. 1.4.5. Поперечное сечение объемной системы цилиндрических трещин
Число активных трещин для этой конфигурации дается оценками

$$m_i \sim \frac{4dt}{b^2} \text{ при } t < Mt_b, \quad (1.4.64)$$

$$m_i = M \text{ при } t > Mt_b.$$

Поступая, как в предыдущих случаях, находим три режима:

- ослабленная (множитель S/b^2) классическая диффузия:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim \frac{S}{b^2} Dt \text{ при } t_b \ll t \ll Mt_b; \quad (1.4.65)$$

- усиленная (множитель M) логарифмическая субдиффузия:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim MDt_1 \ln\left(\frac{t}{Mt_b}\right) \text{ при } Mt_b \ll t \ll Mt_2; \quad (1.4.66)$$

- медленная классическая диффузия:

$$\sigma^{(M)}(t) \sim dt \text{ при } t \gg Mt_2. \quad (1.4.67)$$

Подведем итоги рассмотрения задачи о переносе примеси в периодической системе трещин. Если расстояние между трещинами b таково, что переход к режиму медленной (определяемой свойствами матрицы) классической диффузии произойдет раньше, чем область локализации примеси достигнет соседней трещины ($t_2 \ll t_b$), то перенос происходит, как у одиночной трещины. В противоположном случае $t_2 \gg t_b$, влияние трещин на перенос примеси коллективизируется, и тогда при конечном числе трещин $M \gg 1$ в дополнение к режиму субдиффузии, который был найден для одиночной трещины, возникают дополнительные промежуточные режимы. Среди них в зависимости от конфигурации и соотношения между параметрами задачи могут быть ослабленная классическая диффузия и усиленная степенная или логарифмическая субдиффузия. Самым поздним режимом, как и для одиночной трещины, является медленная классическая диффузия.

Если количество трещин бесконечно ($M \rightarrow \infty$), то для системы плоскопараллельных слоев и объемной системы прямых цилиндров конечным режимом становится ослабленная присутствием матрицы классическая диффузия. Для плоской же системы прямых цилиндров, как и для $M \neq \infty$, самым поздним режимом является медленная классическая диффузия.

1.5. Диффузия по перколяционному кластеру

1.5.1. Постановка задачи

В данном разделе представлена модель, в которой исследуется диффузия частиц во фрактальных средах. Актуальность этой задачи обусловлена тем, что трещины в ненасыщенных скальных породах, определяющие пути быстрого распространения примеси, объединяются в кластеры, которые в определенных пространственных интервалах обладают перколяционными свойствами (см. «Введение» и упомянутую там литературу).

Имеющиеся в литературе результаты, описывающие транспорт в перколяционных средах, в основном дают оценки среднеквадратичного смещения

частиц примеси на больших временах $R(t)$. С точки зрения надежности захоронения радиоактивных отходов интерес представляют также более детальные характеристики распределения концентрации примесей, в частности на расстояниях $r \gg R(t)$ (хвосты концентрации). Для получения таких характеристик требуется уравнение, пригодное для описания эволюции распределения концентрации во времени. Предлагаемые в литературе уравнения, на наш взгляд, не удовлетворительны. Они либо основаны на формализме дробных производных и не подкреплены физическим содержанием [14], либо получены обобщением классического уравнения диффузии с введением зависимости от координат в коэффициенте диффузии [15]. Последнее обстоятельство находится в явном противоречии с тем фактом, что представляющая интерес концентрация примесей является характеристикой, усредненной по ансамблю реализаций сильнонеупорядоченной среды.

Поэтому ниже проведен вывод уравнения переноса примеси в перколяционной среде, не обладающего отмеченными недостатками, а затем (в подразделе 1.5.2) получены асимптотики для распределения концентрации. Сформулируем кратко существенные для нашего анализа свойства среды.

Главной особенностью перколяционных сред является то, что они состоят из не перекрывающихся проницаемых для примесей областей (кластеров), внутри каждой из которых процессы переноса возможны, в то время как переход частиц из одного кластера в другой невозможен. Если среда находится в состоянии выше порога перколяции, то в ней имеется бесконечный кластер, и перенос происходит без ограничения по расстоянию. В среде, находящейся ниже порога перколяции, существуют только конечные кластеры, и перенос на большие расстояния затруднен. Ключевая роль в описании перколяционных систем принадлежит корреляционной длине ξ . Для среды, находящейся в состоянии ниже перколяционного порога, распределение кластеров по размерам l соответствует области $l < \xi$, количество кластеров с размерами $l \gg \xi$ экспоненциально мало. При подходе к порогу перколяции корреляционная длина неограниченно возрастает ($\xi \rightarrow \infty$). Выше порога перколяции корреляционная длина снова становится конечной. При этом распределение конечных кластеров обладает теми же свойствами, что и до порога. Что касается бесконечного кластера, то на пространственных масштабах $L < \xi$ он обладает фрактальными свойствами и является масштабно инвариантным, а на масштабах $L \gg \xi$ становится статистически однородным. Важная топологическая особенность любого кластера состоит в том, что его можно разбить на две подобласти: «позвоночный хре-

бет» (backbone — bb) и множество «мертвых концов» (dead ends — de), так что bb связывает удаленные друг от друга части кластера, а de соединяются с bb, каждый в одном месте, оставаясь изолированными между собой. Существенно, что фрактальная размерность подобласти de больше размерности bb. Далее частицы примеси, находящиеся в bb, будем называть активными. Полное число активных частиц со временем убывает за счет ухода в de, а также локализации в кластерах малых размеров.

С учетом сказанного уравнение для концентрации активных частиц, усредненной по ансамблю реализаций среды, запишем в следующем виде:

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} + Q + \operatorname{div} \vec{j} = 0. \quad (1.5.1)$$

Здесь

$$j_i(r, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d^3 r' f_{ij}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \frac{\partial c(r', t')}{\partial r'_j}. \quad (1.5.2)$$

представляет собой поток частиц, связанный с переносом по bb. По сравнению с обычным уравнением переноса, выражающим закон сохранения полного числа частиц $N(t) \equiv \int d^3 r c(\vec{r}, t)$, в уравнении (1.5.1) содержится дополнительное слагаемое, описывающее уход частиц в de, а также их локализацию в кластерах меньших размеров:

$$Q = \int_{-\infty}^t dt' \phi(t - t') c(\vec{r}, t'). \quad (1.5.3)$$

Ядро $f_{ij}(\vec{r}, t)$ в соотношении (1.5.2) определяет физический механизм переноса частиц. В этой работе будем считать ядро короткодействующим, имея в виду перенос за счет блуждания с ограниченным размером одного шага. Соответственно для описания процессов переноса на масштабах больше указанного шага уравнение (1.5.1) с учетом выражения (1.5.2) приобретает вид

$$\frac{\partial c(\vec{r}, t)}{\partial t} + \int_{-\infty}^t dt' \phi(t - t') c(\vec{r}, t') = D \Delta c. \quad (1.5.4)$$

Проанализируем структуру интегрального ядра $\phi(t)$. Примем во внимание, что на масштабах длин $l \ll \xi$ перколяционная система, обладая фрактальными свойствами, является самоподобной. Это свойство сохраняется

вплоть до размера ξ_0 , определяющего ближний радиус корреляции. Поэтому фрактальный интервал определяется неравенством $\xi_0 \ll l \ll \xi$. Полагая, что на нижней границе интервала все три члена уравнения (1.5.4) должны быть одного порядка, находим оценку:

$$\phi(t) \sim \frac{1}{\tau_0^2} \text{ при } t \lesssim \tau_0, \quad (1.5.5)$$

где $\tau_0 \sim \frac{\xi_0^2}{D}$. Благодаря наличию пространственного интервала фрактальности существует и временной интервал самоподобия. Он определяется неравенством $\tau_0 \ll t \ll \tau$, в котором время τ задано условием $R(\tau) \sim \xi$. Соответственно в интервале $\tau_0 \ll t \ll \tau$, где отсутствует характерный масштаб времени, функция $\phi(t)$ должна иметь степенной вид:

$$\phi(t) \sim -\frac{1}{\tau_0^2} \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{1+\alpha}. \quad (1.5.6)$$

В этом выражении учтено условие сшивки функции $\phi(t)$ с оценкой (1.5.5) при $t \sim \tau_0$. Знак «минус» будет обоснован ниже. Показатель степени α заключен в интервале $0 < \alpha < 1$. Левая граница интервала вытекает из требования сходимости интеграла от функции $\phi(t)$ на больших временах, правая — из условия, чтобы сток при $t \gg \tau_0$ был более заметным, чем производная по времени в (1.5.4). Исходя из (1.5.6), находим образ Лапласа функции $\phi(t)$ ϕ_s в диапазоне лапласовской переменной $\tau^{-1} \ll s \ll \tau_0^{-1}$:

$$\phi_s \cong \frac{1}{\tau_0} (s\tau_0)^\alpha. \quad (1.5.7)$$

За пределами интервала фрактальности на больших временах $t \gg \tau$ функция $\phi(t)$ убывает достаточно быстро, так что существуют все ее степенные моменты по времени, поэтому при $s < \frac{1}{\tau}$ функция ϕ_s разлагается в ряд по целым степеням величины $s\tau$.

1.5.2. Анализ поведения концентрации примеси

Займемся теперь на основе сформулированной модели исследованием поведения концентрации активных частиц примеси в зависимости от координат и времени. Для определенности будем иметь в виду задачу с начальным условием, считая, что при $t = 0$ все частицы сосредоточены в начале координат, выбор которого произволен ввиду трансляционной инвариантности постановки задачи о концентрации, усредненной по ансамблю реализаций; $c(\vec{r}, 0) = N_0 \delta(\vec{r})$. Решение уравнения (1.5.4) имеет вид

$$c(\vec{r}, t) = \frac{N_0}{4\pi D r} \int_{-i\infty}^{+i\infty} \frac{ds}{2\pi i} \exp\left(-\left(\frac{\Phi_s + s}{D}\right)^{1/2} r + st\right). \quad (1.5.8)$$

Рассмотрим следствия, вытекающие из этого выражения. На временах $t \ll \tau_0$ оно сводится к решению классического уравнения диффузии, в котором $Q = 0$ и соответственно $\phi = 0$.

Перейдем к интервалу времени $\tau_0 \ll t \ll \tau$. Интегрированием выражения (1.5.8) по всему пространству получаем полное число активных частиц в зависимости от времени

$$\frac{N(t)}{N(0)} = \frac{\Gamma(1-\alpha) \sin \pi\alpha}{\pi} \left(\frac{\tau_0}{t}\right)^{1-\alpha}. \quad (1.5.9)$$

Отметим, что положительный знак справа здесь обусловлен знаком «минус» в формуле (1.5.6), что и является доказательством правильности выбора этого знака. Концентрация активных частиц при $\tau_0 \ll t \ll \tau$ и дополнительном условии $1 \ll \frac{r}{\xi_0} \ll \frac{t}{\tau_0}$ согласно (1.5.8) имеет общую структуру:

$$c(\vec{r}, t) = \frac{1}{\xi_0^3} \left(\frac{\tau_0}{t}\right)^{\frac{2+\alpha}{2}} F(\eta), \quad \eta \equiv \frac{r}{\xi_0} \left(\frac{\tau_0}{t}\right)^{\frac{\alpha}{2}}. \quad (1.5.10)$$

Функция $F(\eta)$ быстро убывает при $\eta > 1$. Отсюда следует, что среднее смещение частиц примеси за время t имеет оценку

$$R(t) \sim \xi_0 \left(\frac{t}{\tau_0}\right)^{\frac{\alpha}{2}}, \quad (1.5.11)$$

свидетельствующую о том, что ввиду неравенства $0 < \alpha < 1$ перенос примеси в рассматриваемой модели отвечает режиму субдиффузии. Из (1.5.11), в частности, следует оценка верхней границы интервала фрактальности по времени:

$$\tau \sim \tau_0 \left(\frac{\xi}{\xi_0} \right)^{\frac{2}{\alpha}}. \quad (1.5.12)$$

Концентрация активных частиц на малых расстояниях

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{\Gamma\left(\frac{2+\alpha}{2}\right) \sin \frac{\pi\alpha}{2}}{4\pi^2} \frac{1}{\xi_0^3} \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{\frac{2+\alpha}{2}} \text{ при } \eta \ll 1. \quad (1.5.13)$$

Это выражение, как следует из (1.5.9) и (1.5.11), удовлетворяет очевидному соотношению $c(0, t) \sim N(t) / R^3(t)$.

Концентрация на далеких расстояниях (в хвосте) дается формулой

$$c(\vec{r}, t) \sim \frac{1}{\xi_0^3} \left(\frac{\tau_0}{t} \right)^{\frac{2+\alpha}{2}} \eta^{-\frac{1-\alpha}{2-\alpha}} \exp\left(-a\eta^{\frac{2}{2-\alpha}}\right), \quad (1.5.14)$$

$a \sim 1$, при $\eta \gg 1$.

На еще больших расстояниях, таких, что $\frac{r}{\xi_0} \gg \frac{t}{\tau_0}$, субдиффузионный хвост (1.5.13), как следует из (1.5.8), сменяется классической гауссовой асимптотикой (сверхдальним хвостом)

$$c(\vec{r}, t) \cong \frac{1}{(4\pi D_0 t)^{\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{r^2}{4D_0 t}\right). \quad (1.5.15)$$

Поведение концентрации на временах $t \gg \tau$ зависит от того, является ли перколяционная система до- или запороговой. В допороговом состоянии имеет место асимптотика

$$c(\vec{r}, t) \sim \frac{N_0}{\xi_0^3} \left(\frac{\xi_0}{\xi} \right)^{\frac{2+\alpha}{\alpha}} \left(\frac{\tau}{t} \right)^{1+\alpha} \exp\left(-\frac{r}{\xi} - \frac{t}{\tau}\right). \quad (1.5.16)$$

При ее получении было учтено, что согласно (1.5.7) функция ϕ_s имеет

$$\text{точку ветвления при } s \sim -\frac{1}{\tau} \text{ и оценку } \phi_0 \sim \frac{1}{\tau_0} \left(\frac{\tau_0}{\tau} \right)^\alpha.$$

Для переноса в запороговых перколяционных системах активная концентрация разбивается на две части $c(\vec{r}, t) = c_f(\vec{r}, t) + c_\infty(\vec{r}, t)$. Первая из них $c_f(\vec{r}, 0) = c(\vec{r}, 0)(1 - P_\infty)$ отвечает примесям, принадлежащим конечным кластерам, вторая $c_\infty(\vec{r}, t) = c(\vec{r}, t)P_\infty$ — бесконечному кластеру. Поведение концентрации $c_f(\vec{r}, 0)$ совпадает с уже рассмотренным поведением для допороговых состояний. К этим же закономерностям сводится и поведение концентрации $c_\infty(\vec{r}, t)$ при $t < \tau$ с той лишь разницей, что хотя индекс α в (1.5.6) и удовлетворяет неравенству $0 < \alpha < 1$, он отличается теперь от прежнего значения (сравни [16, 17]).

Кардинальное отличие поведения концентрации $c_\infty(\vec{r}, t)$ на временах $t > \tau$ связано с тем, что для бесконечного кластера имеет место равенство $\phi_0 = 0$. Оно вытекает из того факта, что при $t \rightarrow \infty$ количество активных частиц на бесконечном кластере стремится к конечному пределу. В самом деле, из уравнения

$$\frac{\partial N_\infty}{\partial t} + \int_0^t dt \phi(t-t') N_\infty(t') = 0,$$

получающегося из (1.5.4) интегрированием по всему пространству, в силу того, что

$$N_\infty(\infty) \neq 0 \text{ и } \frac{\partial N_\infty(\infty)}{\partial t} = 0,$$

получаем

$$\int_0^\infty dt \phi(t) \equiv \phi_0 = 0.$$

По этой причине в области $s \ll -\frac{1}{\tau}$ главным членом разложения функции

ϕ_s является $\phi_s \equiv As$, где $A \sim \left(\frac{\tau}{\tau_0} \right)^{1-\alpha} \gg 1$. Из этого обстоятельства выте-

кают два важных следствия. Первое: при $t \gg \tau$ концентрация $c_\infty(\vec{r}, t)$ удовлетворяет классическому уравнению диффузии с перенормированным коэффициентом диффузии

$$\tilde{D} = \frac{D}{A}. \quad (1.5.17)$$

Второе следствие дает отношение величин концентрации при $t \rightarrow \infty$ и $t = 0$:

$$N_\infty(\infty) = \frac{N_\infty(0)}{A}. \quad (1.5.18)$$

Поведение концентрации на бесконечном кластере при $t \gg \tau$ в хвосте отвечает трем сменяющим друг друга асимптотикам. Сначала при $r \gg \sqrt{\tilde{D}t}$ идет гауссова асимптотика с перенормированным коэффициентом диффузии \tilde{D} , за ней следует субдиффузионная асимптотика типа (1.5.14) и, наконец, снова гауссова асимптотика, но уже с затравочным коэффициентом диффузии D .

1.5.3. Выводы

В модели переноса примеси в перколяционной среде показано, что главную роль при определении режима миграции играет наличие стоков, внутренне присущих такой среде. На расстояниях меньше корреляционной длины перенос частиц происходит в режиме субдиффузии с характерной для него формой асимптотики (хвоста) концентрации на далеких расстояниях в виде «растянутой экспоненты». В среде, находящейся в состоянии выше порога протекания, на временах больше времени, связанного с корреляционной длиной, перенос описывается в основном классическим уравнением диффузии, но с перенормированным коэффициентом диффузии. При этом концентрация хвоста на умеренно далеких расстояниях является гауссовой, а на сверхдалеких — субдиффузионной. Установлено равенство между двумя факторами — определяющими перенормировку коэффициента диффузии и уменьшение количества активных частиц примеси на больших временах.

1.6. Флуктуационные эффекты и перенормировка источника в сильнонеоднородных средах

Как следует из предыдущих разделов, миграция частиц примеси в сильнонеупорядоченных средах с фрактальными свойствами обычно анализируется на основе обобщенных уравнений переноса. Получающиеся режимы миграции имеют характер аномальной диффузии. Фактически такое описание носит усредненный характер (и концентрация, и сами уравнения являются объектами, усредненными по ансамблю реализаций среды). В то же время ясно, что локальные характеристики фрактальных сред сильно флуктуируют. Возникает вопрос: каким образом эти флуктуации влияют на процесс переноса и каким образом могут быть учтены соответствующие эффекты? В данном разделе влияние флуктуаций на перенос примесей анализируется для источников различных размеров.

Общая схема описания усредненного по ансамблю реализаций переноса примесей в трехмерной среде может быть сформулировано в терминах уравнения непрерывности (см. разделы 1.1 и 1.5)

$$\partial c / \partial t + \operatorname{div} \vec{q} = Q, \quad (1.6.1)$$

где вектор плотности потока q , плотность стоков Q и усредненная по ансамблю реализаций концентрация частиц c являются плавными функциями координат и времени и связаны друг с другом соотношениями

$$q_i(\vec{r}, t) = - \int_{-\infty}^t dt' \int d\vec{r}' f_{ij}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \frac{\partial c(\vec{r}', t')}{\partial r'_j}, \quad (1.6.2)$$

$$Q(\vec{r}, t) = \int_{-\infty}^t \phi(t - t') c(\vec{r}, t') dt'. \quad (1.6.3)$$

Отличительной чертой фрактальных сред является существование пространственного диапазона $a < r < \xi$, в котором различные характеристики этих сред обладают свойствами масштабной инвариантности. Соотношения (1.6.1)—(1.6.3) инвариантны по отношению к изменению масштаба $r \rightarrow sr$ при одновременном преобразовании всех величин в (1.6.1)—(1.6.3) согласно $M \rightarrow s^{-\Delta_M} M$, где показатель Δ_M называется масштабной размерностью величины M . Значения показателей Δ_M в конечном счете и определяют режим переноса примеси в диапазоне фрактальности. На масштабах $r > \xi$ система становится статистически однородной, и дис-

персия примеси происходит по закону классической диффузии. Границы пространственного диапазона фрактальности a и ξ называются соответственно нижней границей фрактальности и корреляционным радиусом.

В случае, когда характерный размер источника примеси превосходит a , флуктуации свойств системы не влияют на ее поведение, поскольку на этих масштабах мы можем непосредственно пользоваться системой (1.6.1)—(1.6.3). Если же размер источника примеси порядка или меньше нижнего размера фрактальности a , система (1.6.1)—(1.6.3) неприменима, и для описания переноса в ближней области $r < a$ необходимо учитывать сильные флуктуации свойств проводимости среды. Предположим, что нас интересуют достаточно большие интервалы времени, когда размер облака примеси существенно превосходит нижнюю границу фрактальности a . Построим воображаемую сферу S_1 с характерным радиусом $R_1 \gg a$ и поместим источник внутри нее. Форму сферы выберем такой, что концентрация примеси на поверхности постоянна, если рассматривается точечный источник, помещенный в начало, совпадающее с центром реального источника. Полный поток Q из источника к поверхности можно представить в виде

$$Q = A(c_0 - c_1), \quad (1.6.4)$$

где c_0 и c_1 — концентрации на фактической поверхности источника S и поверхности S_1 соответственно. Величина A определяется свойствами среды между этими поверхностями (ближняя зона). Поток Q непрерывен на поверхности S_1 и, следовательно, может быть выражен через характеристики среды вне поверхности S_1 (в дальней зоне), где справедливо обобщенное уравнение переноса

$$Q = Bc_1. \quad (1.6.5)$$

Исключая концентрацию c_1 из уравнений (1.6.4) и (1.6.5), приходим к соотношениям

$$Q = KQ_0, \quad Q_0 = Bc_0, \quad K = A(A + B)^{-1}. \quad (1.6.6)$$

Для заданной концентрации на поверхности источника величина Q_0 соответствует мощности источника в отсутствие флуктуаций свойств среды, Q — эффективная мощность источника, уменьшенная вследствие флуктуаций, а K — коэффициент перенормировки мощности источника.

На расстояниях $|r| \gg a$ средняя концентрация может быть выражена в терминах эффективной мощности Q независимо от размера источника (см. разделы 1.1 и 1.4).

Коэффициент A не может быть выведен из обобщенных уравнений переноса, так как для него требуется знание распределения характеристик среды в ближней зоне, где они сильно флуктуируют. Ситуация во многом напоминает задачу о проводимости вследствие подбарьерного туннелирования, исследованную Райхом и Рузиным в [18]. Воспользуемся их подходом. Как и проводимость в [18], коэффициент передачи в нашей задаче определяется редкими комбинациями благоприятных условий (например, трещин для переноса примеси в скальных породах) или так называемыми проколами. Вклад F в коэффициент передачи от индивидуальных проколов статистически распределен в широком диапазоне их значений. Этот вклад можно представить как $F = F_0 \exp(-u)$, где u — вспомогательная переменная, принимающая значения в диапазоне от 0 до ∞ . Как и в [18], концентрацию проколов на единицу площади источника поверхности S можно определить выражением

$$\rho(u) = (S_0)^{-1} \exp[-\Omega(u)], \quad (1.6.7)$$

где $S_0^{1/2}$ — характерный размер сечения прокола, малый по сравнению со средним расстоянием между проколами; $\Omega(u)$ — функция со свойствами $\Omega(u) \gg 1$, $\partial\Omega/\partial u < 0$, $\partial^2\Omega/\partial u^2 > 0$. Усредненный по ансамблю коэффициент передачи

$$\langle A \rangle = S \frac{F_0}{S_0} \int_0^\infty du \exp(-u - \Omega(u)). \quad (1.6.8)$$

Подынтегральная функция в этом выражении имеет резкий пик. Поэтому с точностью до предэкспоненциального фактора из (1.6.8) следует

$$\langle A \rangle = Sb, \quad b \approx \frac{F_0}{S_0} \exp[-u_{\text{opt}} - \Omega_{\text{opt}}], \quad (1.6.9)$$

где b — удельный коэффициент передачи (не зависящий от площади поверхности источника); $\Omega_{\text{opt}} = \Omega(u_{\text{opt}})$; u_{opt} соответствует оптимальным проколам и определяется из условия $(\partial\Omega(u)/\partial u)_{u=u_{\text{opt}}} + 1 = 0$. Условие

применимости результата (1.6.9) равнозначно требованию, что среднее число оптимальных проколов велико на поверхности источника $S\rho(u_{\text{opt}}) \gg 1$, или, другими словами,

$$S > S_*, \quad S_* = S_0 \exp(\Omega_{\text{opt}}). \quad (1.6.10)$$

Если площадь поверхности мала ($S < S_*$) и среднее число оптимальных проколов меньше единицы, усредненный по ансамблю коэффициент передачи определяется интегралом в (1.6.8), в котором нижний предел должен быть заменен на величину $u = u_f$, соответствующую проколам, среднее число которых для этой площади порядка единицы: $S\rho(u_f) \sim 1$. Тогда с точностью до предэкспоненциального фактора имеем

$$\langle A \rangle = S_* b \exp\left[-(u_f - u_{\text{opt}})\right], \quad S < S_*. \quad (1.6.11)$$

По определению и согласно (1.6.7) и (1.6.10) величина u_f удовлетворяет соотношению

$$\frac{S}{S_*} \exp\left[\Omega_{\text{opt}} - \Omega(u_f)\right] = 1. \quad (1.6.12)$$

Отметим, что в то время как для больших размеров источника ($S > S_*$) величина $\langle A \rangle$ уменьшается пропорционально площади, согласно (1.6.11) и (1.6.12) для малых размеров источника ($S < S_*$) она уменьшается гораздо быстрее.

Еще один эффект, вызванный флуктуациями свойств неупорядоченной среды, состоит в увеличении статистического разброса коэффициента передачи $\langle A \rangle$ с уменьшением размера источника. Расчеты, аналогичные выполненным для проводимости туннельных барьеров в [18] показывают, что относительный разброс $\Delta(A) = \left\langle (A - \langle A \rangle)^2 \right\rangle^{1/2} / \langle A \rangle$ мал, если $S > S_*$, сравним с единицей при $S < S_*$ и может быть много больше единицы, если $S \ll S_*$.

Принимая во внимание результаты, полученные для коэффициента передачи, можно заключить, что коэффициент перенормировки мощности источника стремится к единице для источников больших размеров ($K \cong 1$

при $S \gg S_*$), и его средняя величина для малых размеров определяется выражением

$$\langle K \rangle \cong \langle A \rangle / B \ll 1 \text{ при } S \ll S_*. \quad (1.6.13)$$

Как и для величины A , статистический разброс $\Delta(K)$ коэффициента перенормировки возрастает с уменьшением площади. Естественно, характерная площадь S_* , разделяющая области с двумя различными режимами переноса примесей (флуктуации несут при $S > S_*$ и должны учитываться при $S < S_*$), порядка a^2 .

Таким образом, пространственные флуктуации характеристик среды существенно подавляют усредненную по ансамблю мощность для источников малых размеров. В то же время значения эффективной мощности имеют большой статистический разброс.

Выводы. В данном разделе рассмотрены эффекты, к которым приводят флуктуации свойств фрактальной среды на масштабах, меньших нижней границы фрактальности. Показано, что в случае, когда размеры источника примесей оказываются меньше предельных масштабов, пространственные флуктуации проводимости приводят к значительной перенормировке мощности источника. При этом с уменьшением размера источника коэффициент перенормировки катастрофически уменьшается, а статистический разброс его возможных значений растет.

Литература

1. Паташинский А. З., Покровский В. Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. — М.: Наука, 1975.
2. Федорюк М. В. Метод перевала. — М.: Наука, 1977.
3. Зинн-Жюстен Ж. Континуальный интеграл в квантовой механике. — М.: Физматлит, 2006.
4. Головизнин В. М., Киселев В. П., Питербарг В. И. и др. Генерация случайных полей трещиноватости с заданной корреляционной функцией и заданным средним. — М., 2003. — 23 с. — (Препринт / ИБРАЭ РАН; № ИВРАЕ-2003-17).
5. Карабасов С. А. Разностные схемы с пространственным расщеплением временной производной для задач двухфазной фильтрации: Дис. ... канд. физ.-мат. наук / ИБРАЭ РАН. — М., 1999.
6. Абрикосов А. А., Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. Методы квантовой теории поля в статистической физике. — М.: ИФМЛ, 1962.

7. *Финкельберг В. М.* Распространение волн в случайной среде: Метод корреляционных групп // ЖЭТФ. — 1967. — Т. 53, № 40.
8. *Дыхне А. М., Кондратенко П. С., Матвеев Л. В.* Перенос примеси в перколяционных средах // Письма в ЖЭТФ. — 2004. — Т. 80, № 464.
9. *Кондратенко П. С., Матвеев Л. В.* Асимптотические режимы и структура «хвостов» концентрации в модели Дыхне // ЖЭТФ. — 2007. — Т. 131, № 494.
10. *Kondratenko P. S., Matveev L. V.* Random advection in a fractal medium with finite correlation length // Phys. Rev. E. — 2007. — Vol. 75, Iss. 5. — P. 051102.
11. Справочник по специальным функциям / М. Абрамовиц, И. Стиган (ред.). — М.: Наука, 1979.
12. *Havlin S., ben-Avraham D.* Diffusion in disordered media // Adv. Phys. — 1987. — Vol. 36. — P. 695—798.
13. *Архинчеев В. Е., Баскин Э. М.* Аномальная диффузия и дрейф в гребешковой модели перколяционных кластеров // ЖЭТФ. — 1991. — Т. 100. — С. 292—300.
14. *Compte A.* Stochastical foundations of fractional dynamics // Phys. Rev. E. — 1996. — Vol. 53, 4191—4193.
15. *Mendez V., Campos D., Fort J.* Dynamical features of reaction-diffusion fronts in fractals // Phys. Rev. E. — 2004. — Vol. 69. — P. 016613—016620.
16. *Gefen Y., Aharony A.* Anomalous diffusion on percolating clusters // Phys. Rev. Let. — 1983. — Vol. 50, № 1. — P. 77—80.
17. *Harris A., Meir Y., Aharony A.* Diffusion on percolating clusters // Phys. Rev. B. — 1987. — Vol. 36, № 16. — P. 8752—8764.
18. *Raikh E. M., Ruzin I. M.* Transmittancy fluctuations in randomly non-uniform barriers and incoherent mesoscopics // Mesoscopic Phenomena in Solids / Ed. by B. L. Altshuler, P. A. Lee and R. A. Webb. — Amsterdam, North-Holland, 1991. — P. 315—368.

Глава 2. Прямое численное моделирование аномальной диффузии

2.1. Стохастический подход к моделированию аномальной диффузии

Главный путь распространения радиоактивных материалов к водоносным горизонтам — перенос с подземными водами. Из-за сильных пространственных флуктуаций скорости просачивания в неоднородных средах перенос примесей сопровождается дисперсией — неизотропным расширением размеров пятна примесей во всех направлениях. Ниже в этом разделе мы будем говорить только об этом процессе, считая скорость среднего переноса примеси равной нулю (этого можно достичь соответствующим выбором системы отсчета).

В определенных условиях, когда радиус корреляции скоростей фильтрации конечен, дисперсия носит классический, фиковский характер, и размер области, в которой сосредоточена основная масса примеси, растет со временем по закону $\Delta \sim t^{1/2}$. Однако многие экспериментальные исследования [1—8] обнаруживают аномальное, нефиковское поведение при дисперсии примеси, когда оказывается, что $\Delta \sim t^{1/\alpha}$, причем $\alpha \neq 2$.

Существует несколько различных подходов к моделированию аномальной дисперсии [8]. В одном из них используется тот известный факт, что диффузия может быть описана процессом случайного блуждания частиц (CTRM — Continuous Time Random Walk Theory). Если дисперсия смещения частицы в одном акте блуждания конечна, этот процесс носит классический характер, и $\alpha = 2$. К аномальной диффузии приводит процесс блуждания с таким распределением смещений, при котором конечной дисперсии смещения не существует. Распределения такого типа известны под названием распределений Леви, а сам процесс блуждания частицы с таким распределением называют полетами Леви [1; 3; 8]. В этом случае оказывается, что $\alpha < 2$, т. е. распространение примесей идет быстрее, чем при классической диффузии (супердиффузия).

При практическом использовании модели случайных блужданий возникает характерная трудность, заключающаяся в необходимости генерации случайных последовательностей смещений с распределением, имеющим бесконечную дисперсию.

Особую роль в теории СТМ играют случайные величины с так называемыми устойчивыми распределениями. Функция распределения $F(X)$ случайной величины X называется устойчивой в широком смысле, если нормированная сумма n одинаково распределенных (с функцией распределения $F(X)$) случайных величин $\frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n - b_n}{a_n}$ имеет опреде-

ленную функцию распределения $G(X)$ при $n \rightarrow \infty$ (a_n, b_n — некоторые константы). В этом случае говорят, что распределение F принадлежит к области притяжения распределения G . Если нормированная сумма n одинаково распределенных с функцией распределения $F(X)$ случайных величин при $n \rightarrow \infty$ выполняет ту же функцию распределения $F(X)$ (т. е. функции $G(X)$ и $F(X)$ совпадают), распределение $F(X)$ называется строго устойчивым. Строго устойчивые распределения обладают тем свойством, что сумма (нормированная) любого количества одинаково распределенных случайных величин имеет то же распределение.

Роль строго устойчивых распределений очевидна: суммарные смещения (сумма ряда последовательных смещений) распределены так же, как отдельные смещения, и пространственное распределение частиц остается подобным самому себе независимо от числа отдельных смещений.

Примером строго устойчивого распределения является нормальное распределение. Любое распределение с конечным математическим ожиданием и конечной дисперсией устойчиво в широком смысле: сумма n случайных величин с таким распределением при $n \rightarrow \infty$ имеет согласно центральной предельной теореме нормальное распределение.

Из теории вероятностей [9] известно, что все устойчивые в широком смысле распределения — это распределения с конечной дисперсией либо со степенными зависимостями на хвостах (с точностью до медленно меняющейся функции).

$$p(x) \approx x^{-(\alpha+1)}, \quad x \gg 1,$$

где показатель α лежит в диапазоне от 0 до 2.

Генерация строго устойчивых случайных величин с тяжелыми хвостами затруднена из-за отсутствия аналитических выражений для плотности вероятности самой функции распределения и обратной ей. Исключение составляют распределения Гаусса, Коши и Леви [8; 10; 11].

Путь решения этой проблемы был впервые намечен в [11] для распределений с $\alpha < 1$, а затем обобщен на любые α [12]. Генераторы типа [11; 12] называют точными. Наряду с ними разрабатываются так называемые аппроксимационные генераторы, основанные на использовании обобщенной предельной теоремы. Так, для симметричных распределений такой генератор описан в [13]. В следующем подразделе описан генератор аппроксимационного типа [8] для моделирования случайных последовательностей со строго устойчивыми распределениями.

2.1.1. Алгоритм генерации случайных величин со степенными тяжелыми хвостами

Алгоритм основан на использовании обобщенной предельной теоремы Гнеденко — Леви [8; 13; 14]. Обобщенная предельная теорема [9] утверждает, что область притяжения устойчивых в широком смысле степенных распределений совпадает со строго устойчивыми (α -стабильными, фрактальными) распределениями Леви с тяжелыми степенными хвостами, если $0 < \alpha < 2$. Это значит, что распределение величины

$$\frac{X_1 + X_2 + \dots + X_n}{a_n} - b_n,$$

где X_1, X_2, \dots, X_n — n случайных чисел со степенным распределением при больших X с $0 < \alpha < 2$, стремится к строго устойчивому распределению (α -стабильное распределение Леви) при $n \rightarrow \infty$.

Нормировочные константы определяются следующим образом:

$a_n = n^{1/\alpha}$, $b_n = E(X_i)n/n^{1/\alpha}$ при $1 < \alpha \leq 2$, когда математическое ожидание $E(X_i)$ существует;

$a_n = n^{1/\alpha}$, $b_n = 0$ при $0 < \alpha < 1$, когда математического ожидания случайной величины X не существует.

α -стабильное распределение Леви с тяжелыми хвостами может быть несимметричным относительно нуля; фактор асимметрии

$$\beta = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{1 - F(x)}{1 - F(x) + F(-X)},$$

$$1 - \beta = \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{F(-x)}{1 - F(x) + F(-X)}.$$

Приведенные формулы дают способ построения генератора строго устойчивых случайных величин.

Генерируются произвольные, устойчивые в широком смысле распределения, и сумма достаточного количества последовательных чисел из этой серии является аппроксимацией для строго устойчивой случайной величины.

Функция распределения для устойчивой в широком смысле величины выбирается из соображения наибольшей простоты для поиска обратной функции к функции распределения.

Ниже предложен и опробован один из возможных вариантов генератора случайных величин с тяжелыми хвостами для всего диапазона изменения параметров α и β .

2.1.2. Генератор серий устойчивых в широком смысле случайных величин

В настоящее время известны аналитические выражения для плотности вероятности строго устойчивых распределений с тяжелыми хвостами для двух значений параметра α . Это симметричное распределение Коши ($\alpha = 1$)

$$p(x) = \frac{1}{\pi} \frac{t}{t^2 + x^2}$$

и полностью асимметричное распределение Леви ($\alpha = 0,5$)

$$p(x) = \frac{t}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{x^{3/2}} e^{-\frac{t^2}{x}}$$

В предлагаемом генераторе для произвольных значений параметра α случайные величины генерируются по правилу

$$X_i = A \left(\frac{1}{y_i^{1/\alpha}} - 1 \right) \text{sign}(z_i),$$

где y_i, z_i — равномерно распределенные на отрезке $[0, 1]$ случайные величины; A — произвольная числовая константа, характеризующая интенсивность диффузии; $\text{sign}(z_i) = -1$, если $z_i > \beta$, $\text{sign}(z_i) = 1$, если $z_i \leq \beta$.

Такие случайные величины имеют область изменения от $-\infty$ до $+\infty$.

Нетрудно видеть, что

$$F(-x) = \frac{A^\alpha}{(x+A)^\alpha} (1-\beta) \sim (1-\beta) A^\alpha x^{-\alpha}, \text{ если } 0 < \alpha \leq 2,$$

$$F(x) = 1 - \frac{A^\alpha}{(x+A)^\alpha} \beta \sim 1 - \beta A^\alpha x^{-\alpha}, \text{ если } 0 < \alpha \leq 2.$$

Плотность вероятности определяется соотношениями

$$p(-x) = \frac{A^\alpha}{(x+A)^{\alpha+1}} \alpha (1-\beta), \text{ если } 0 < \alpha \leq 2,$$

$$p(x) = \frac{A^\alpha}{(x+A)^{\alpha+1}} \alpha \beta, \text{ если } 0 < \alpha \leq 2.$$

Математическое ожидание для случая, когда оно существует и необходимо центрирование (если $1 < \alpha \leq 2$), равно

$$\frac{A}{1-\alpha} (1-2\beta).$$

На основе этого генератора разработана одномерная нестационарная стохастическая модель распространения примеси, для которой характерна неограниченность дисперсии местоположения частиц примеси при разных реализациях процесса.

Отметим, что в стохастических моделях случайных блужданий, где местоположение частиц определяется как сумма перемещений за шаг по времени Δt , не обязательно добиваться на каждом временном шаге хорошей аппроксимации строго устойчивой случайной величины. Чем больше шаг по времени, тем точнее должна быть аппроксимация. При измельчении шага по времени начиная с некоторых пространственных масштабов сумма перемещений имеет распределение, стремящееся к строго устойчивому распределению Леви (соответствующие иллюстрации приведены ниже).

2.1.3. Скорость сходимости генератора строго устойчивых случайных величин

Изложенный выше алгоритм был реализован численно. Проведена проверка скорости сходимости распределения сумм случайных величин с увеличением n к строго устойчивым распределениям для различных значений параметров α и β .

Установлено, что разработанный вариант генератора для случая $0 < \alpha < 1$ сходится достаточно быстро для всех значений β . Однако чем больше асимметрия, тем более длинная серия требуется для сходимости.

Если $0 < \alpha \leq 0,5$, то длина серии $n = n_{\text{jump}} = 10$ оказывается практически достаточной даже для полной асимметрии. Дальнейшее увеличение длины серии не приводит к заметному изменению в плотности вероятности для серии. Это демонстрирует **рис. 2.1.1**. На больших расстояниях распределение имеет степенную зависимость (**рис. 2.1.2**).

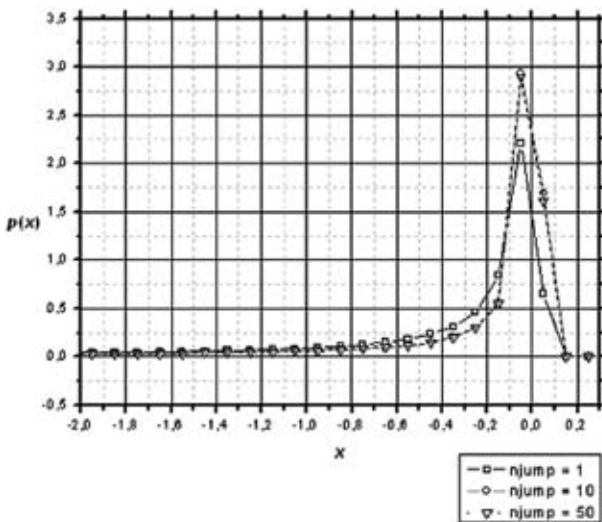


Рис. 2.1.1. Сходимость генератора случайных чисел к устойчивому распределению. $A = 0,5$, $\beta = 0,1$, число реализаций для построения распределения $n_j = 50\,000$. Кривая $n_{\text{jump}} = 1$ соответствует плотности вероятности исходной случайной величины

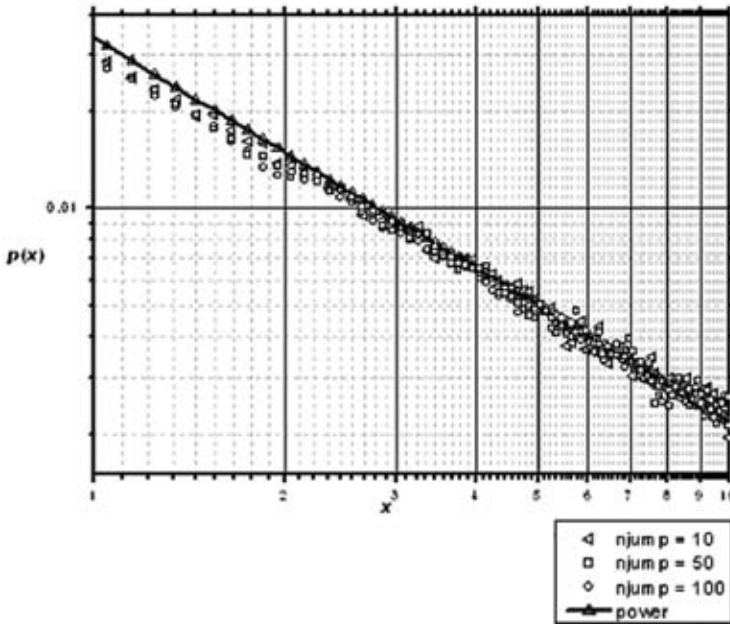


Рис. 2.1.2. Данные **рис. 2.2.1** в логарифмическом масштабе для $(-x) > 1$

В диапазоне $0,5 < \alpha < 1$ требуемая длина серии увеличивается: приемлемым для полностью асимметричного случая является $n_{\text{jump}} = 50$ (**рис. 2.1.3**).

На **рис. 2.1.4** приведены результаты сравнения модельной и аналитической плотности вероятности для случая $\alpha = 0,5, \beta = 1$, на **рис. 2.1.5** — то же для случая $\alpha = 1, \beta = 0$. Аналитические выражения для плотности вероятности существуют только для этих значений параметров α и β .

По мере увеличения α ($1 < \alpha < 2$) скорость сходимости замедляется. Так, для $\alpha = 1,5$ в полностью асимметричном случае требуемая длина серии $n_{\text{jump}} = 100$ (для симметричного случая достаточно $n_{\text{jump}} = 50$, **рис. 2.1.6**). При $\alpha = 1,9$ в полностью асимметричном случае приемлемая длина серии n_{jump} оказывается равной 200.

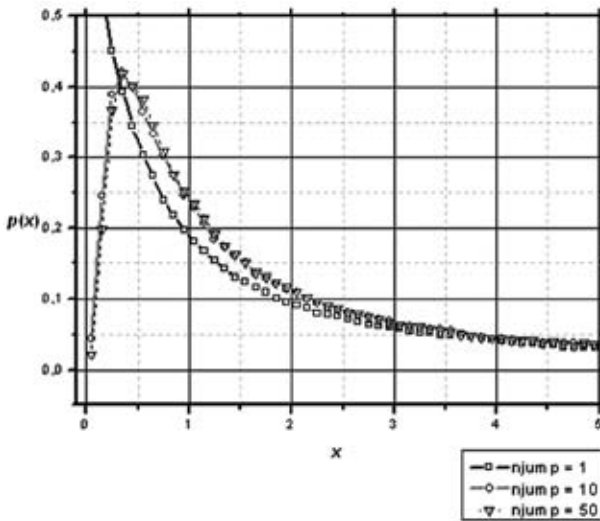


Рис. 2.1.3. Сходимость генератора случайных чисел к устойчивому распределению. $A = 1$, $\beta = 1$, число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$. Кривая $n_{\text{jump}} = 1$ соответствует плотности вероятности исходной случайной величины

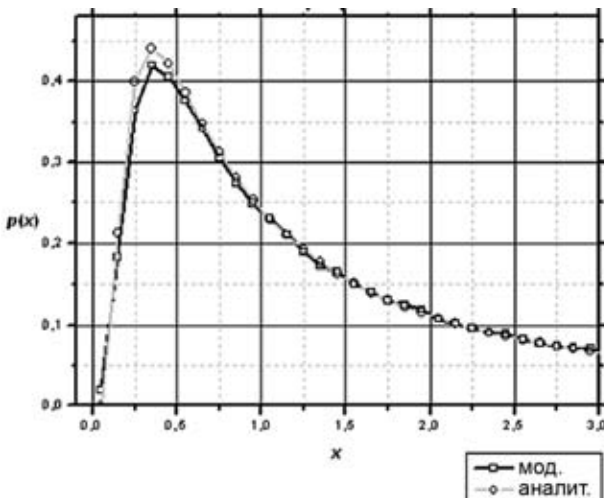


Рис. 2.1.4. Модельная и аналитическая кривые плотности вероятности. $A = 0,7$, $\beta = 1$, число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$

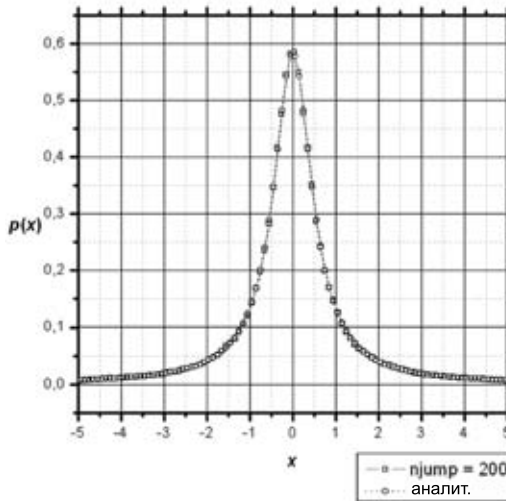


Рис. 2.1.5. Кривая плотности вероятности модельная и аналитическая. $A = 1$, $\beta = 0,5$, число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$

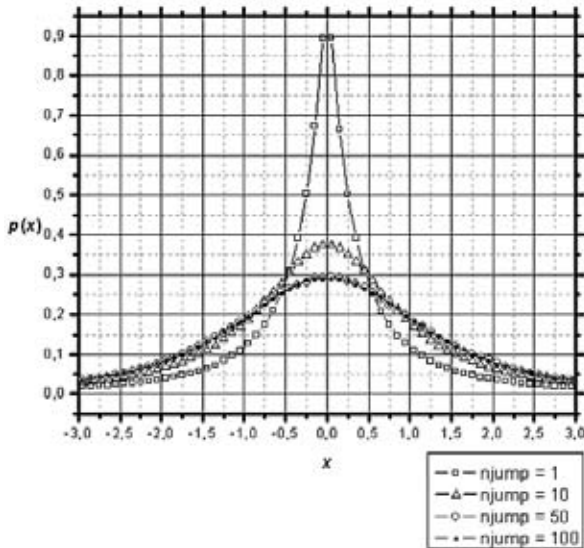


Рис. 2.1.6. Сходимость генератора случайных чисел к устойчивому распределению. $A = 1$, $\beta = 0,5$, число реализаций для построения распределения $n_j = 200\,000$. Кривая $n_{\text{jump}} = 1$ соответствует плотности вероятности исходной случайной величины

2.1.4. Стохастическая одномерная нестационарная модель процесса распространения примеси с тяжелыми хвостами в распределении

В этой модели рассчитываются траектории большого количества точек, испытывающих на каждом временном шаге случайные смещения, имеющие устойчивое распределение Леви. Стохастические уравнения для координат частиц в процессе случайного блуждания таковы:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t^{1/\alpha} \xi_i,$$

где x_i^n — координата i -й точки в n -й момент времени; ξ_i — случайная величина, которая получена на основе предложенного базового алгоритма для генерирования устойчивой случайной величины в широком смысле либо является суммой таких величин (аппроксимация строго устойчивой случайной величины); Δt — временной шаг; α — параметр степенного распределения.

Приведенное уравнение дает смещение частицы за один временной шаг. В случае строгой устойчивости распределения ξ_i , при таком определении этого смещения изменение распределения частиц за произвольное время T не будет зависеть от временного шага. В этом случае из уравнений движения частиц следует, что пространственный масштаб распределения частиц меняется со временем, как $r \sim t^{1/\alpha}$. Другими словами, движение автомодельно, и автомодельная координата имеет вид $r/t^{1/\alpha}$.

На **рис. 2.1.7** поазано сравнение модельных результатов и известного аналитического решения с $\alpha=1$ (симметричное распределение Коши) в разные моменты времени. В качестве ξ_i здесь использовалась аппроксимация строго устойчивой случайной величины. Длина серии $n_{\text{jump}} = 50$, как видно из **рис. 2.1.7**, имеет место хорошее согласие результатов.

На **рис. 2.1.8** представлено решение для асимметричного распределения с $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,1$ в момент времени $t = 0,1$, шаг по времени $\Delta t = 0,001$. Здесь в качестве ξ_i берутся исходная устойчивая только в широком смысле случайная величина и аппроксимация строго устойчивой случайной величины с $n_{\text{jump}} = 30$. Нетрудно видеть, что после 100 шагов результаты практически одинаковы при любой длине серии.

Таким образом, при решении практических задач совершенно не обязательно на каждом шаге по времени использовать идеальную

аппроксимацию строго устойчивого распределения. Более чем достаточно разбить временной интервал до момента времени, который представляет интерес, на шаги (от несколько десятков до сотни).

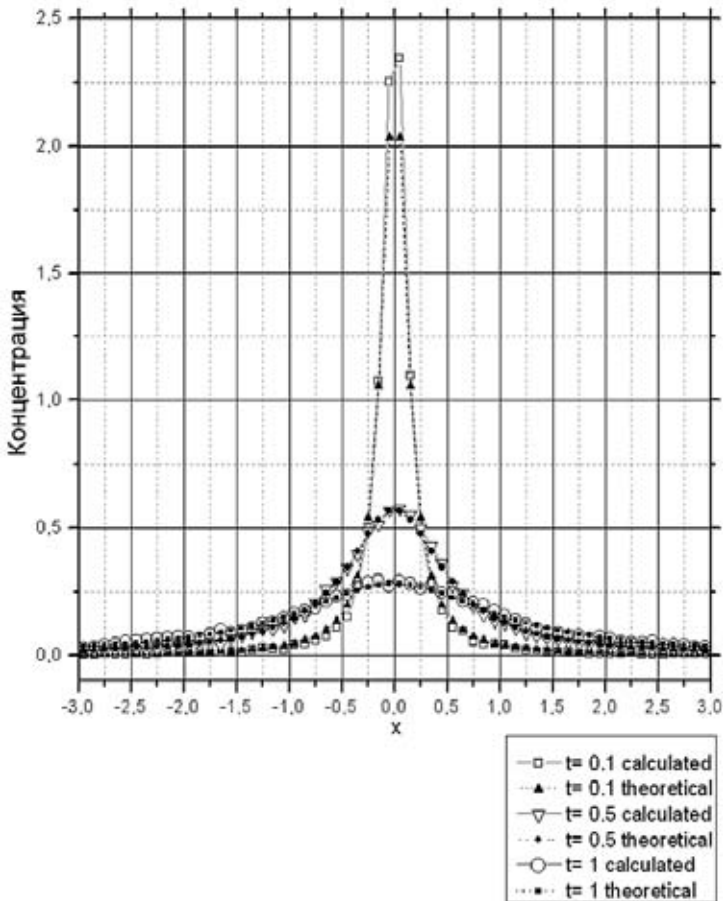


Рис. 2.1.7. Концентрация примеси (плотность вероятности положения частиц примеси) по стохастической модели и аналитическое решение в разные моменты времени

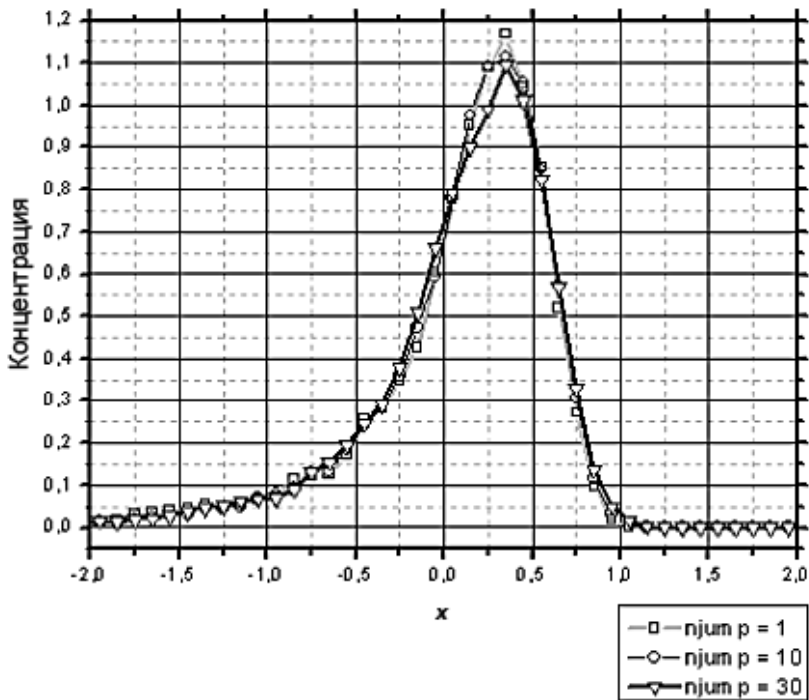


Рис. 2.1.8. Асимметрия в распределении.
 $\alpha = 0,5$, $\beta = 0,1$, $\Delta t = 0,001$, разные длины серий

2.1.5. Двумерные и трехмерные стохастические модели случайных блужданий

Обобщение представленной выше одномерной модели аномальной диффузии на многомерный случай очевидно: исходя из предположения о том, что движения частиц вдоль разных направлений независимы, получаем систему уравнений для трехмерного случая:

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t^{1/\alpha_1} \xi_i,$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t^{1/\alpha_2} \eta_i,$$

$$z_i^{n+1} = z_i^n + \Delta t^{1/\alpha_3} \mu_i,$$

где ξ_i, η_i, μ_i — строго устойчивые случайные величины с тяжелыми хвостами в распределениях. Здесь представлен наиболее общий вариант, когда величины ξ_i, η_i, μ_i имеют, вообще говоря, разные параметры распределения α и β (модель А).

Двумерная осесимметричная версия стохастической модели (модель В) описывается уравнениями

$$x_i^{n+1} = x_i^n + \Delta t^{1/\alpha} \xi_i \cos \theta_i,$$

$$y_i^{n+1} = y_i^n + \Delta t^{1/\alpha} \xi_i \sin \theta_i,$$

где ξ_i — случайные величины, являющиеся аппроксимацией строго устойчивых; θ_i — равномерно распределенная на отрезке $[0, \pi]$ случайная величина, которая не меняется со временем.

Для сглаживания результатов при вычислении концентрации при относительно небольшом числе пробных частиц считалось, что каждая частица представляет собой кубический объем с однородно распределенной плотностью. Вклад в плотность от каждой частицы в данной ячейке расчетной сетки считается пропорциональным доле ее кубического объема, оказавшейся внутри ячейки. Размеры объема могут варьироваться в пределах от размера ячейки до двух размеров ячейки.

На **рис. 2.1.9, 2.1.11, 2.1.13** приведены вычисленные аналитически плотности вероятности местоположения частиц для случая, когда движение по оси x отвечает $\alpha_1 = 0,5$, а по оси y — $\alpha_2 = 1$ для различных моментов времени (модель А).

Эти же плотности вероятности для различных моментов времени были построены с помощью стохастической модели со следующими параметрами:

по оси x — $\alpha_1 = 0,5, \beta_1 = 0, A = 1$;

по оси y — $\alpha_2 = 1, \beta_2 = 0,5, A = 0,7$;

количество частиц — 200 000, $dt = 0,1$.

Полученные решения приведены на **рис. 2.1.10, 2.1.12, 2.1.14**. Как видно, стохастическая модель в двумерном случае хорошо соответствует известным аналитическим решениям Коши и Леви [8].

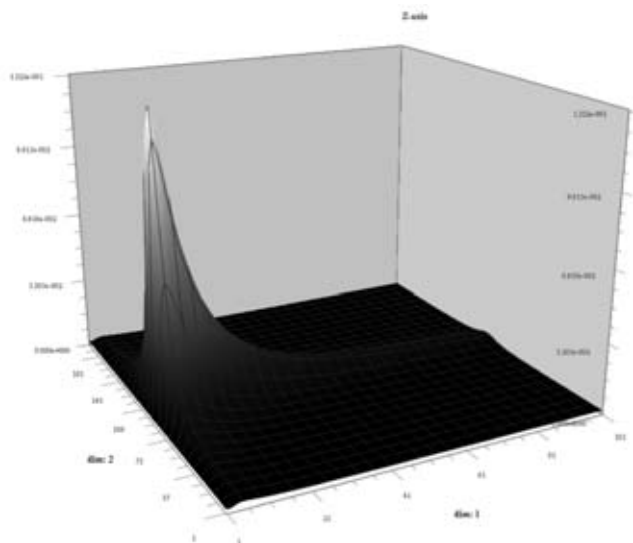


Рис. 2.1.9. Аналитическое решение для $t = 1$

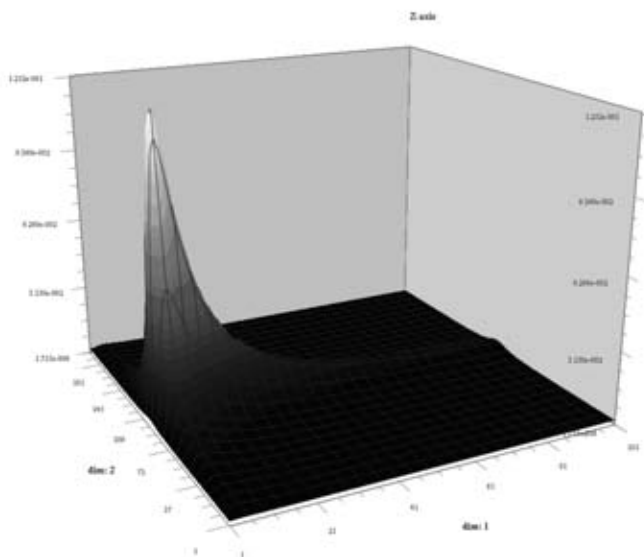


Рис. 2.1.10. Стохастическое решение для $t = 1$

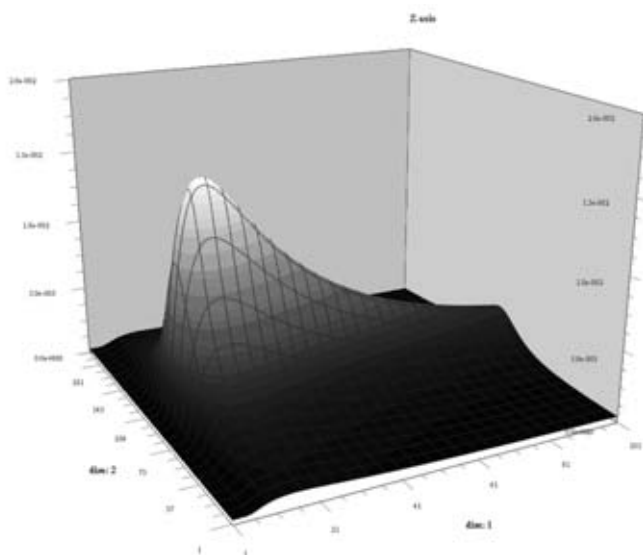


Рис. 2.1.11. Аналитическое решение для $t = 2$

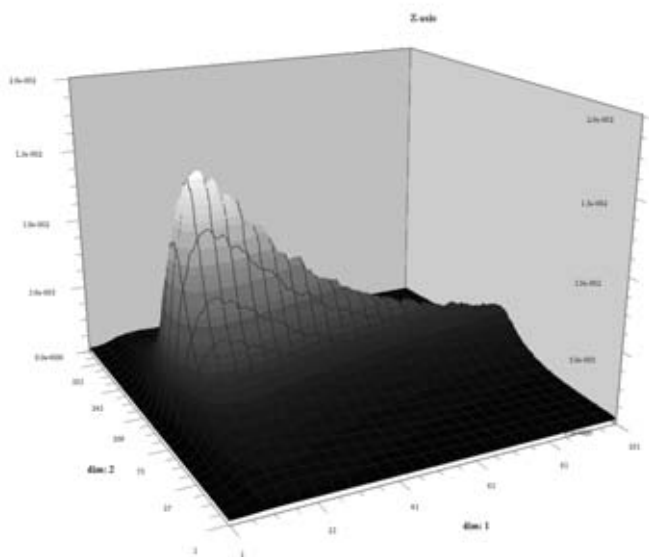


Рис. 2.1.12. Стохастическое решение для $t = 2$

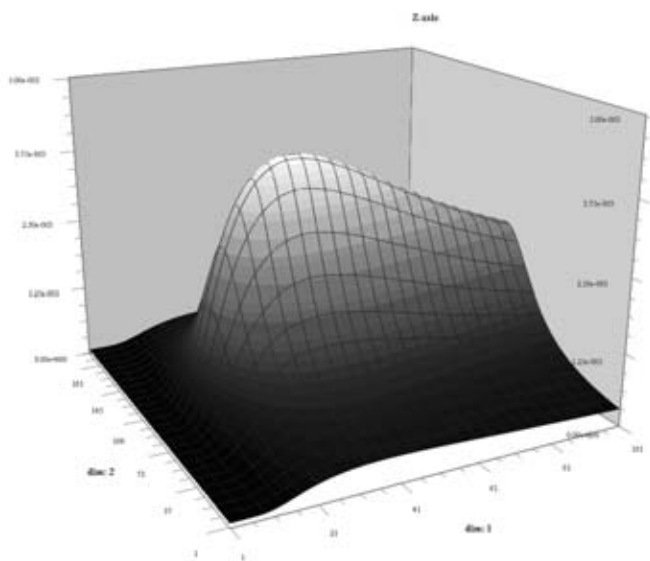


Рис. 2.1.13. Аналитическое решение для $t = 3$

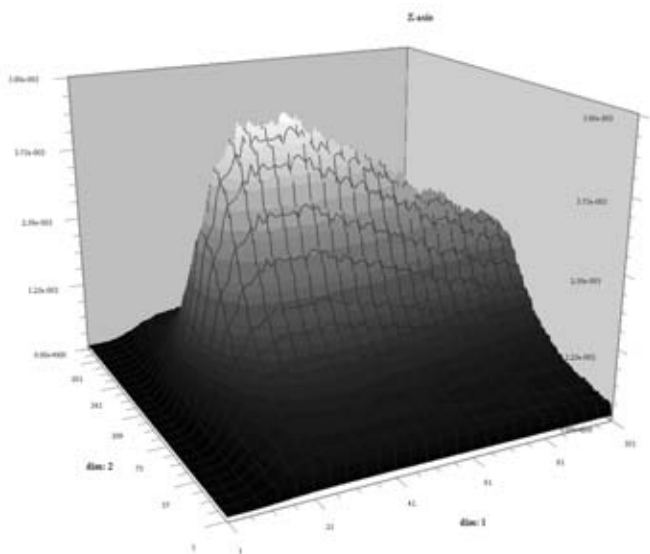


Рис. 2.1.14. Стохастическое решение для $t = 3$

2.1.6. Некоторые статистические закономерности фрактальных полетов Леви

Как известно, одномерное распределение концентрации от точечного мгновенного источника при обычной диффузии таково, что существуют моменты всех порядков по координате, в частности, $\langle r^2 \rangle = \int c(x)r^2 dx \sim t$.

При случайных блужданиях с распределением Леви профиль концентрации имеет степенной хвост с показателем α на больших расстояниях, поэтому второй и высшие моменты не существуют.

Можно поставить вопрос о моментах низших порядков, в том числе о моментах дробного порядка, которые естественно определить как

$$\langle r^\gamma \rangle = 2 \int_0^\infty c(x)x^\gamma dx,$$

где $\gamma < \alpha$. Так, определенные моменты существуют и в принципе могут быть вычислены.

Заметим, что для классической диффузии математическое ожидание

$$\langle r^\gamma \rangle = 2 \int_0^\infty x^\gamma \frac{1}{\sqrt{2\pi t}} e^{-\frac{x^2}{2t}} dx = 2t^{\gamma/2} / \sqrt{\pi} \int_0^\infty 2^{\gamma/2} \left(\frac{x^2}{2t} \right)^{\gamma/2} e^{-\frac{x^2}{2t}} d \frac{x}{\sqrt{2t}} = t^{\gamma/2} \text{const}$$

для любого γ .

Как уже отмечалось, распределение частиц является автомодельным, т. е. зависит только от автомодельной переменной $r/t^{1/\alpha}$ (при обычной диффузии профиль концентрации определяется как $r/t^{1/2}$).

Аналитическое выражение для плотности вероятности полетов Леви, как правило, неизвестно (за исключением двух случаев, отмеченных выше). Однако если исходить из автомодельности плотности вероятности, временную зависимость моментов распределения можно установить. Из условия нормировки

$$C \int_{-\infty}^{+\infty} p(x/t^{1/\alpha}) dx = 1 \Rightarrow C = t^{-1/\alpha}$$

следует, что нормировочная константа пропорциональна $t^{-1/\alpha}$. Тогда

$$\langle r^\gamma \rangle = 2t^{-1/\alpha} \int_0^\infty x^\gamma p\left(\frac{x}{t^{1/\alpha}}\right) dx = 2t^{\gamma/\alpha} \int_0^\infty \left(\frac{x}{t^{1/\alpha}}\right)^\gamma p\left(\frac{x}{t^{1/\alpha}}\right) d \frac{x}{t^{1/\alpha}} = t^{\gamma/\alpha} \text{const.}$$

Это соотношение справедливо только для тех значений γ , при которых сходится несобственный интеграл, т. е. при $\gamma < \alpha$. Для классической диффузии, как было показано,

$$\langle r^\gamma \rangle \sim t^{\gamma/2}, \text{ а } \langle r^\gamma \rangle^{1/\lambda} \sim t^{1/2}.$$

Для аномальной диффузии с полетами Леви

$$\langle r^\gamma \rangle^{1/\lambda} \sim t^{1/\alpha} \quad (\gamma < \alpha, \quad 0 < \alpha < 2).$$

Отсюда следует, что величина математического ожидания $\langle r^\gamma \rangle^{1/\gamma}$ в случае аномальной диффузии всегда растет со временем быстрее, чем при классической диффузии, причем разница возрастает с уменьшением α .

На **рис. 2.1.15** представлены результаты аппроксимации $1/\alpha$ для $\langle r^{0,1} \rangle^{10} \sim t^{1/\alpha}$.

Совершенно такие же закономерности прослеживаются для трехмерных моделей.

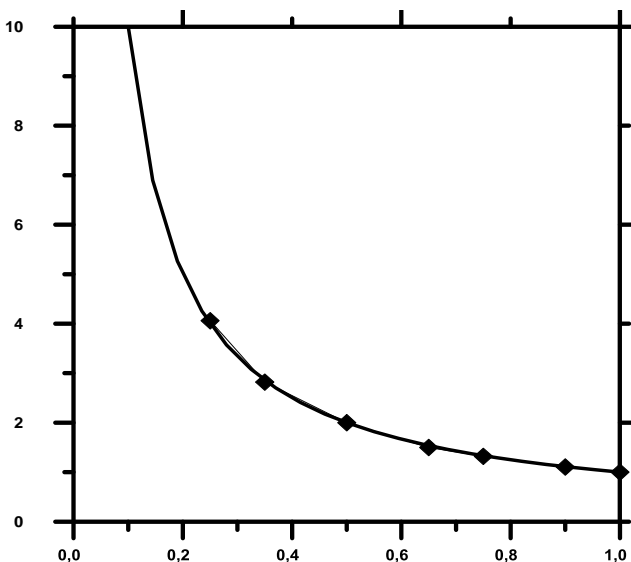


Рис. 2.1.15. Результаты аппроксимации $1/\alpha$ для $\langle r^{0,1} \rangle^{10} \sim t^{1/\alpha}$.

Сплошная линия — теоретическая кривая,
квадратные маркеры — результаты расчетов

2.2. Элементы дробного интегро-дифференциального исчисления. Дробная диффузия

Математический аппарат дробного интегрирования и дифференцирования имеет давнюю историю [15, с. 9—16]. В настоящее время теория дробного интегро-дифференциального исчисления представляет собой одну из ветвей теории функций комплексных переменных и приобретает большое практическое значение в различных областях знаний [10; 16: 17]. Математические модели, базирующиеся на дробных производных, находят применение в математической биологии [18], гидрогеологии при моделировании процессов тепло- и массопереноса в сильнонеоднородных средах [6; 19—24;], в задачах упругопластичности, трансзвуковых течений, исследованиях в области полупроводников, в эпидемиологии, финансах и др.

Дробные интегралы и производные целого порядка — это обычные интегралы и производные. Однако в случае дробного порядка эти понятия имеют своеобразную специфику, которая проявляется, например, в том, что в разных ситуациях совершенно естественно возникают их различные модификации. Таким образом, существует несколько подходов к определению производной дробного порядка [15]. Среди них определения Вейля, Грюнвальда—Летникова, Римана — Лиувилля, и все они применяются в разработанных и описанных в данной монографии вычислительных алгоритмах.

2.2.1. Определение Вейля

Определение дробной производной в смысле Вейля (Weyl) [15] основано на обобщении оператора дифференцирования в Фурье-пространстве. Если функция $\phi(x)$ абсолютно интегрируема на отрезке $[-\pi, \pi]$, то она представима в виде бесконечной суммы (ряда Фурье)

$$\phi(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} \phi_k e^{ikx}, \quad \phi_k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \phi(x) e^{-ikx} dx.$$

Оператор первой производной в Фурье-пространстве — это множитель $(-ik)$, производная целой степени n — это соответственно $(-ik)^n$. Приняв, что последнее утверждение справедливо и для нецелых значений n , получим определение дробной производной по Вейлю для абсолютно интегрируемой 2π -периодической функции:

$$D_{\pm}^{\alpha} \phi(x) \sim \sum_{k=-\infty}^{\infty} (\mp ik)^{\alpha} \phi_k e^{ikx}. \quad (2.2.1)$$

Дробная производная Вейля 2π -периодической функции — также 2π -периодическая функция. Здесь $(\pm ik)^\alpha = |k|^\alpha \exp\left\{\pm \frac{\alpha\pi i}{2} \text{sign } k\right\}$.

2.2.2. Определение Грюнвальда—Летникова

Совершенно другой подход используется в определении дробной производной Грюнвальда—Летникова (Gruenwald—Letnikov). Рассмотрим конечно-разностные определения целых производных различного порядка:

$$\frac{F(x) - F(x-h)}{h}, \quad \frac{F(x) - 2F(x-h) + F(x-2h)}{h^2}, \quad (2.2.2)$$

$$\frac{F(x) - 3F(x-h) + 3F(x-2h) - F(x-3h)}{h^3}.$$

Эти соотношения при $h \rightarrow 0$ дают соответственно первую, вторую и третью производные от $F(x)$. Формулы (2.2.2) могут быть обобщены на производные произвольного порядка:

$$F^{(\alpha)}(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta_h^\alpha F(x)}{h^\alpha}, \quad \Delta_h^\alpha F(x) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \binom{\alpha}{k} F(x - kh), \quad (2.2.3)$$

где биномиальные коэффициенты определяются из выражения

$$\binom{\alpha}{k} = \frac{\alpha(\alpha-1)\dots(\alpha-k+1)}{k!} = \frac{\Gamma(\alpha+1)}{\Gamma(k+1)\Gamma(\alpha-k+1)},$$

где Γ — гамма-функция.

В выражениях (2.2.3) бесконечный ряд сходится абсолютно и равномерно при всех $\alpha > 0$ для любой ограниченной функции [15]. Таким образом, производная Грюнвальда—Летникова подчиняется равенству

$$D_{\pm}^\alpha \phi(x) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{\Delta_{\pm h}^\alpha \phi(x)}{h^\alpha}, \quad \alpha > 0, \quad (2.2.4)$$

и существует для интегрируемых по Лебегу функций [15].

2.2.3. Определение Римана—Лиувилля

Идея еще одного определения дробной производной заключается в обобщении формулы Коши для n -кратного интеграла на дробный порядок n :

$$\int_a^x \int_a^{x_{n-1}} \dots \int_a^{x_1} \phi(x_0) dx_0 \dots dx_{n-1} = \frac{1}{(n-1)!} \int_a^x (x-t)^{n-1} \phi(t) dt.$$

Отсюда получаем определение дробного интеграла по Риману—Лиувиллю (Riemann—Liouville):

$$\begin{cases} I_{a+}^\alpha \phi(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_a^x (x-t)^{\alpha-1} \phi(t) dt, \\ I_{b-}^\alpha \phi(x) = \frac{1}{\Gamma(\alpha)} \int_x^b (t-x)^{\alpha-1} \phi(t) dt, \quad \alpha > 0. \end{cases}$$

Данные интегралы определены в классе интегрируемых по Лебегу функций на отрезке $[a, b]$ и существуют почти всюду. Дробное дифференцирование вводится как операция, обратная дробному интегрированию:

$$\begin{cases} D_{a+}^\alpha \phi(x) = D^m I_{a+}^{m-\alpha} \phi(x) = \frac{1}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_a^x \frac{\phi(t) dt}{(x-t)^{\alpha-m+1}}, \\ D_{b-}^\alpha \phi(x) = (-1)^m D^m I_{b-}^{m-\alpha} \phi(x) = \frac{(-1)^m}{\Gamma(m-\alpha)} \frac{d^m}{dx^m} \int_x^b \frac{\phi(t) dt}{(t-x)^{\alpha-m+1}}, \end{cases} \quad (2.2.5)$$

где $m=1, 2, \dots$ и $0 \leq m-1 < \alpha \leq m$. Дробные производные Римана—Лиувилля определены в классе функций, непрерывно дифференцируемых на отрезке $[a, b]$ до порядка $[\alpha-1]$, и также существуют почти всюду [15].

Для достаточно «хороших» (например, дифференцируемых на отрезке $[a, b]$) функций определения дробных производных по Вейлю (2.2.1), Грюнвальду—Летникову (2.2.3) и Риману—Лиувиллю (2.2.5) эквивалентны [15].

2.2.4. Примеры производных дробного порядка

Для наглядности представленных выше определений в табл. 2.2.1 приведены примеры интегралов дробного порядка от некоторых элементарных функций. В ней содержатся не только дробные интегралы, но и дробные производные. Формулы из этой таблицы могут быть получены при условии $\operatorname{Re} \alpha > 0$, а затем распространены на $\operatorname{Re} \alpha \leq 0$ методом аналитического продолжения по параметру α . Значения дробных интегралов различных специальных и элементарных функций можно найти в [15, с. 140—143].

Таблица 2.2.1. Примеры производных дробного порядка

№ п/п	$\varphi(x), x \in \mathbb{R}^1$	$(I_+^\alpha \varphi)(x), x \in \mathbb{R}^1, \alpha \in \mathbb{C}$
1	$e^{\lambda x}$	$\lambda^{-\alpha} e^{\lambda x}, \operatorname{Re} \lambda > 0$
2	$(b - ax)^{\gamma-1}$	$\frac{\Gamma(1-\alpha-\gamma)}{\Gamma(1-\gamma)a^\alpha} (b-ax)^{\alpha+\gamma-1},$ $a > 0, ax < b, \operatorname{Re}(\alpha+\gamma) < 1$
3	$(x-a)_+^{\beta-1}$	$\frac{\Gamma(\beta)}{\Gamma(\alpha+\beta)} (x-a)_+^{\alpha+\beta-1}, \operatorname{Re} \beta > 0$
4	$\frac{1}{(1 \pm ix)^\mu}$	$\frac{\Gamma(\mu-\alpha)}{\Gamma(\mu)} e^{\pm \alpha \pi i / 2} \frac{1}{(1 \pm ix)^{\mu-\alpha}},$ $\operatorname{Re}(\mu-\alpha) > 0, \mu \neq 0, -1, -2, \dots$
5	$\sin(\lambda x)$	$\lambda^{-\alpha} \sin(\lambda x - \alpha \pi / 2),$ $\lambda > 0, \operatorname{Re} \alpha < 1$
6	$\cos(\lambda x)$	$\lambda^{-\alpha} \cos(\lambda x - \alpha \pi / 2),$ $\lambda > 0, \operatorname{Re} \alpha < 1$

2.2.5. Модель дробной диффузии

В классической модели дисперсия длины пробега является конечной величиной, что свидетельствует о наличии в среде характерного масштаба. На расстояниях, много больших этого масштаба, среду можно считать однородной. При отсутствии характерного размера среда считается сильнонеоднородной.

В статистической модели случайного блуждания нейтральных частиц в сильнонеоднородных средах вместо гауссова распределения длины пробега следует брать α -стабильное распределение Леви, характеризующееся бесконечно большой дисперсией и наличием степенных хвостов. В этом случае частицы время от времени будут совершать так называемые полеты Леви — перемещаться на значительные расстояния, что можно физически интерпретировать как попадание частицы в очень длинную трещину, внутри которой перемещение считается мгновенным. Если параметр

распределения Леви $\alpha \in (1, 2)$, то математическое ожидание существует и при стремлении временного шага к нулю и описывается интегро-дифференциальным уравнением, которое принято называть уравнением с дробными пространственными производными [15; 16] или уравнением дробной диффузии [23; 25; 26]. При $\alpha = 2$ уравнение дробной диффузии переходит в классическое диффузионное уравнение. Существенным отличием переноса, описываемого уравнением дробной диффузии, от классического является степенной характер убывания концентрации диффундирующего вещества на бесконечности.

Уравнение дробной диффузии — это обобщение классического уравнения диффузии. В одномерном случае к уравнению дробной диффузии можно прийти с помощью замены производной второго порядка по пространству на дробный порядок (от 1 до 2).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = (1 + \beta) \frac{D}{2} \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} + (1 - \beta) \frac{D}{2} \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha}, \quad (2.2.6)$$

где $C(x, t)$ — концентрация переносимой субстанции; D — коэффициент дисперсии; α — дробная степень оператора дифференцирования ($1 \leq \alpha \leq 2$); β — коэффициент его кососимметричности ($-1 \leq \beta \leq 1$).

В отличие от классической дробная диффузия имеет решения, которые сильно скошены (несимметричны) и имеют тяжелые хвосты. Это означает, что концентрация вещества вдали от источника при дробной диффузии на порядки выше, чем в классической модели. На **рис. 2.2.1—2.2.3** представлены профили решений уравнения (2.2.6) с начальным условием $C(x, t)|_{t=0} = \delta(x)$ для различных параметров α и β . Здесь $\delta(x)$ — дельта-функция Дирака. На этих рисунках прослеживается физический смысл параметров уравнения дробной диффузии. Коэффициент α характеризует неоднородность, гетерогенность среды, в которой происходит перенос вещества, коэффициент β — неизотропность или несимметричность этой среды.

Роль показателя α в случае $1 < \alpha \leq 2$ при оценке концентрации на больших расстояниях и, следовательно, безопасности захоронений состоит в следующем. Пусть T — время, за которое описываемая уравнением дробной диффузии концентрация от мгновенного точечного источника на заданном единичном расстоянии (используем безразмерные переменные) достигает уровня 10^{-8} от максимального. Отметим, что даже столь малые концентрации фактически могут оказаться опасными из-за превышения санитарных норм. Время T сильно зависит от порядка α при прочих

равных условиях (считаем дисперсию равной 1 — это означает, что основное ядро распределения за единичное время достигает единичной ширины). Даже небольшое отклонение параметра α от значения $\alpha = 2$ (классическая диффузия) приводит к уменьшению T на два-три порядка величины. Чтобы достичь заданной концентрации за то же время при классической диффузии, потребовалось бы соответственно увеличить коэффициент диффузии. Зависимость увеличенного таким образом коэффициента диффузии от параметра α показана на рис. 2.2.4. Наиболее сильна эта зависимость при $\alpha \rightarrow 2$.

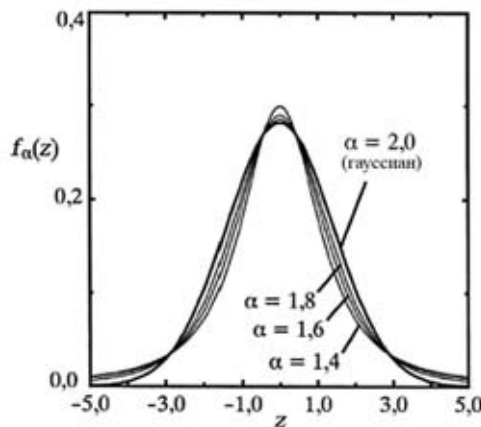


Рис. 2.2.1. Решения уравнения дробной диффузии при различных параметрах α

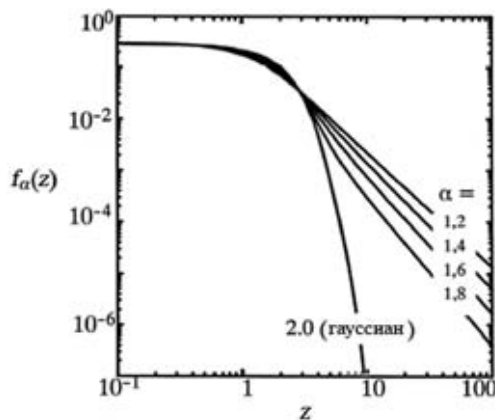


Рис. 2.2.2. Решения уравнения дробной диффузии при различных параметрах α в логарифмическом масштабе

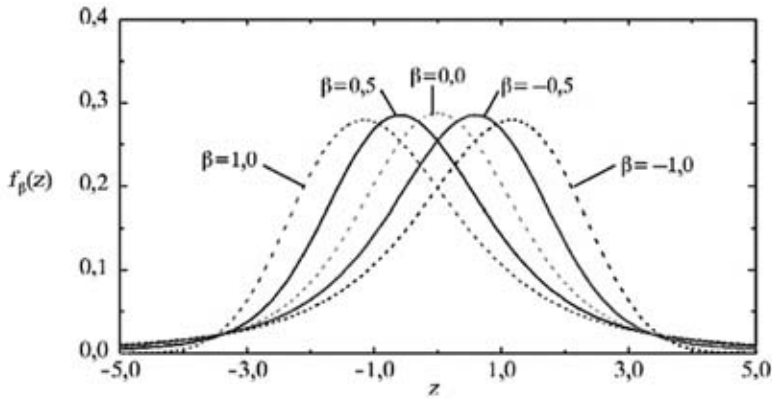


Рис. 2.2.3. Решения уравнения дробной диффузии при различных параметрах скошенности β ($\alpha = 1,5$)

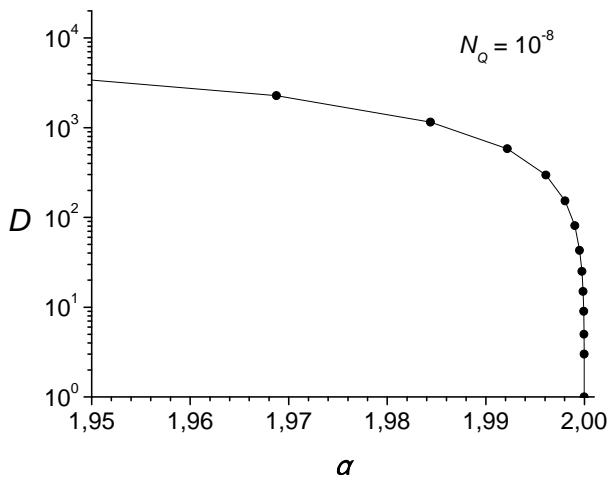


Рис. 2.2.4. Зависимость от порядка дробной производной α эффективного коэффициента классической диффузии, необходимого для обеспечения того же времени достижения концентрации 10^{-8} в заданной точке, что и при дробной диффузии

Другое усложнение модели случайного блуждания в сильнонеоднородных средах связано с введением дополнительной случайной переменной, описывающей распределение моментов времени, в которые осуществляется перескакивание частицы из одной трещины в другую. Если среднее время между перескоками конечно, процесс также описывается уравнением, содержащим первую производную по времени и дробные производные

по пространству (уравнением дробной диффузии). Отличие будет заключаться только в появлении постоянного множителя перед временной переменной. Если же среднее время ожидания оказывается бесконечным, то вместо первой производной по времени также появляется дробная производная с показателем, меньшим единицы.

Таким образом, в общем случае стохастическое блуждание консервативных частиц в сильнонеоднородной трещиноватой среде описывается линейным эволюционным уравнением с дробными производными как по пространственным, так и по временной переменным.

2.2.6. Вывод уравнения дробной диффузии. Способ Эйлера

В основе классической модели диффузии лежит первый закон Фика, который в одномерном случае имеет вид

$$F = -D \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (2.2.7)$$

где F — поток массы вещества через единичную площадь в единицу времени; D — эффективный коэффициент диффузии среды.

Этот закон утверждает, что поток частиц через единичную площадь в единицу времени прямо пропорционален пространственному градиенту концентрации. Движение частицы, подчиняющееся закону Фика, может быть исследовано с помощью конечно-разностной модели диффузии частиц между двумя ячейками (рис. 2.2.5).

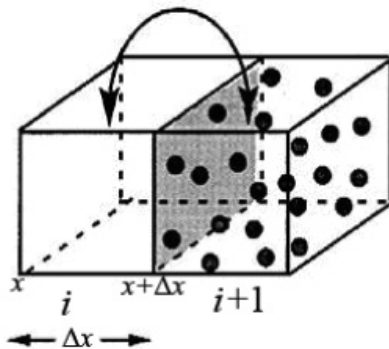


Рис. 2.2.5. Диффузия частиц между двумя ячейками длины Δx

Пусть M_i — число частиц в элементарной ячейке i . Тогда концентрация в каждой элементарной ячейке

$$C_i = \frac{M_i}{\Delta v}, \quad (2.2.8)$$

где $\Delta v = A\Delta x$ — объем каждой элементарной ячейки; A — площадь сечения ячейки, перпендикулярного направлению Δx .

Полагая, что каждая частица перемещается случайно влево или вправо вдоль оси x с вероятностью R , находим, что число ушедших из i -й ячейки частиц за малый единичный промежуток времени Δx составляет $M_i R \Delta t$.

Пусть поток F_i — число частиц, перешедших из ячейки i в ячейку $i+1$ за интервал времени Δx :

$$\begin{aligned} F_i &= \frac{\frac{1}{2}(M_i - M_{i+1})R}{A} = \frac{\frac{1}{2}(C_i - C_{i+1})\Delta v R}{A} = \\ &= \frac{1}{2}(C_i - C_{i+1})R\Delta x. \end{aligned} \quad (2.2.9)$$

Здесь $C_{i+1} - C_i \equiv C(x + \Delta x, t) - C(x, t)$. Разложение функции концентрации в ряд Тейлора по x дает

$$\begin{aligned} C(x + \Delta x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\partial^n C(x, t)}{\partial x^n} \frac{\Delta x^n}{n!} = \\ &= C(x, t) + \frac{\partial C}{\partial x}(x, t)\Delta x + o(\Delta x), \end{aligned} \quad (2.2.10)$$

где

$$o(\Delta x) = \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}(x, t) \frac{\Delta x^2}{2!} + \frac{\partial^3 C}{\partial x^3}(x, t) \frac{\Delta x^3}{3!} + \dots \quad (2.2.11)$$

В результате уравнение (2.2.9) переходит в

$$F = \frac{1}{2} \left[\frac{\partial C}{\partial x} \Delta x + o(\Delta x) \right] R \Delta x. \quad (2.2.12)$$

Чтобы при $\Delta x \rightarrow 0$ удовлетворять закону Фика, требуем:

$$\frac{1}{2} \Delta x^2 R \rightarrow D;$$

$$\frac{1}{2} o(\Delta x^2) R \rightarrow 0.$$

Иными словами, в классической модели диффузии $R \rightarrow \infty$ с той же скоростью, что и $\Delta x^2 \rightarrow 0$, т. е. $\Delta x \sim \Delta t^{1/2}$.

Производная целого порядка зависит только от локального поведения функции и характеризует ее наклон в бесконечно малом интервале. В отличие от целой производной дробная производная — нелокальная. Значение производной дробного порядка от функции в заданной точке зависит от характера всей функции.

Дробную производную естественно представить в виде линейной комбинации левосторонней и правосторонней производных:

$$D_{\beta}^q = \left[\frac{1}{2}(1-\beta) \right] D_+^q + \left[\frac{1}{2}(1+\beta) \right] D_-^q, \quad (2.2.13)$$

где $\frac{1}{2}(1-\beta)$ и $\frac{1}{2}(1+\beta)$ — вероятности того, что частица переместится влево или вправо вдоль оси x ; D_+^q — производная на интервале от x до $+\infty$; D_-^q — производная на интервале от $-\infty$ до x .

Для получения уравнения дробной диффузии по аналогии с классической моделью разложим функцию концентрации в ряд. Применим обобщенное разложение в ряд Тейлора:

$$\begin{aligned} C(x + \Delta x, t) &= \sum_{n=-\infty}^{\infty} D_{\beta}^{n+q}(C) \frac{\Delta x^{n+q}}{\Gamma(n+q+1)} = \\ &= D_{\beta}^q C(x, t) \frac{\Delta x^q}{\Gamma(q+1)} + o(\Delta x^q), \end{aligned} \quad (2.2.14)$$

где q — дробная степень оператора производной D_{β}^q . Эта запись справедлива также и для целых значений параметра q , так как в этом случае гамма-функция эквивалентна факториалу.

Подставляя новое разложение в уравнение (2.2.9), находим обобщенный поток:

$$F = \frac{1}{2} \left[D_{\beta}^q(C) \frac{\Delta x^q}{\Gamma(q+1)} + o(\Delta x^q) \right] R \Delta x. \quad (2.2.15)$$

Устремляя $\Delta x \rightarrow 0$, получаем дробный закон Фика

$$F = D D_{\beta}^q(C), \quad (2.2.16)$$

который может быть выражен в следующем виде:

$$F = D \left[\left(\frac{1}{2}(1+\beta) \right) D_+^q(C) + \left(\frac{1}{2}(1-\beta) \right) D_-^q(C) \right]. \quad (2.2.17)$$

Аналогично классическому случаю при $\Delta x \rightarrow 0$ требуем:

$$\frac{1}{2} \frac{\Delta x^{q+1}}{\Gamma(q+1)} R \rightarrow D,$$

$$\frac{1}{2} o(\Delta x^{q+1}) R \rightarrow 0.$$

В противоположность недробной стандартной диффузии $R \rightarrow \infty$ с той же скоростью, что и $\Delta x^{q+1} \rightarrow 0$, т. е. $\Delta x \sim \Delta t^{1/\alpha}$, где $\alpha = q+1$.

Дробный закон Фика в отличие от классического допускает, что частицы из любой ячейки могут переместиться более чем на одну ячейку за малый интервал времени Δt (рис. 2.2.6). Причем вероятность того, что частица совершит прыжок на k ячеек, уменьшается с увеличением k .

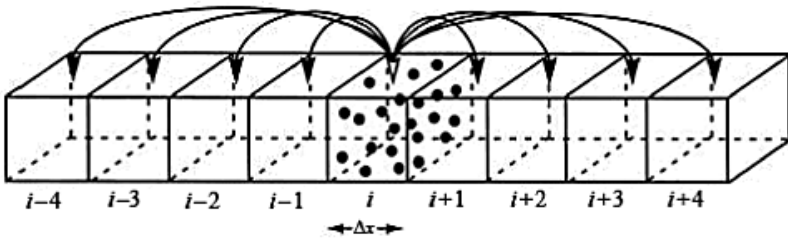


Рис. 2.2.6. В случае дробного закона Фика частицы из ячейки i могут перемещаться дальше, чем на одну ячейку, за интервал Δt

На основе дробного закона Фика получим уравнение дробной диффузии

$$F_x = -n_e D_x D_{\beta}^q(C), \quad (2.2.18)$$

где n_e — эффективная пористость среды.

Подставляя поток F_x из выражения (2.2.18) в одномерное уравнение сохранения массы

$$-n_e \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial F_x}{\partial x}, \quad (2.2.19)$$

находим

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x} D_x D_\beta^q(C) \right]. \quad (2.2.20)$$

Положив $\alpha = q + 1$ и $D_x \equiv D = \text{const}$, приходим к уравнению (2.2.6).

2.3. Нестационарная одномерная модель диффузии с дробной производной и численные методы решения

Одномерное уравнение диффузии, в котором второй порядок дифференцирования по пространству заменен на дробный, имеет следующий вид [15; 23; 25—28]:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u(x, t)}{\partial t} &= \mathcal{D} D_x^\alpha u(x, t), \quad 1 \leq \alpha \leq 2, \\ D_x^\alpha &= \frac{1}{2}(1+\beta) \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} + \frac{1}{2}(1-\beta) \frac{\partial^\alpha}{\partial (-x)^\alpha}, \quad -1 \leq \beta \leq 1, \end{aligned} \quad (2.3.1)$$

где функция $u(x, t)$ характеризует концентрацию переносимой субстанции; D_x^α — оператор дифференцирования дробного порядка α по x ; $\mathcal{D} > 0$ — константа размерности $L^\alpha T^{-1}$ (обобщенный коэффициент диффузии); β — коэффициент скошенности или кососимметричности; x и t — соответственно пространственная и временная переменные.

При $\alpha \rightarrow 2$ оператор дробной производной вырождается в дифференциальный оператор второго порядка, отвечающий обычной диффузии с экспоненциальным затуханием решения на бесконечности.

Положим \mathcal{D} равным единице. Рассмотрим различные численные методы решения уравнения

$$\frac{\partial C}{\partial t} = L_\beta^\alpha C, \quad L_\beta^\alpha = \frac{1+\beta}{2} \frac{\partial^\alpha}{\partial x^\alpha} + \frac{1-\beta}{2} \frac{\partial^\alpha}{\partial (-x)^\alpha}. \quad (2.3.2)$$

Это уравнение будем решать на отрезке $x \in [0, 2\pi]$, который покроем равномерной расчетной сеткой. Значения концентраций отнесем к узлам

сетки, а значения потоков — к центрам ячеек. В качестве начального условия при тестировании численных схем в нестационарном случае примем сеточную дельта-функцию, смещенную относительно начала координат на π : $C(x, t = 0) = \delta(x - \pi)$. Высота сеточной дельта-функции обратна шагу расчетной сетки h , где $h = 2\pi / (N - 1)$; N — полное число узлов включая граничные:

$$\delta_h(x - \pi) = \begin{cases} 1/h, & \text{если } i = N/2, \\ 0, & \text{если } i \neq N/2. \end{cases} \quad (2.3.3)$$

2.3.1. Метод Фурье

При условии, что коэффициенты α и β , входящие в уравнение (2.3.2), постоянны, периодическое решение $C(x, t) = C(x + 2\pi, t)$ этого уравнения будем искать с помощью разложения в ряд Фурье. Применяя преобразование Фурье к уравнению (2.3.2), находим:

$$\begin{aligned} \phi_k(t) &= \phi_k(t_0) [\cos(\psi t) + i \sin(\psi t)] \exp(|k|^\alpha \cos(\pi\alpha/2)t), \\ \psi &= -|k|^\alpha \beta \sin(\pi\alpha/2). \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Выполнив обратное преобразование, получим решение исходного уравнения (2.3.2). Здесь применено определение дробной производной по Вейлю (2.2.1). При практической реализации этой процедуры при различных начальных условиях естественно воспользоваться стандартными численными алгоритмами быстрого преобразования Фурье.

2.3.2. Конечно-разностный метод

Этот метод основан на определении дробной производной Грюнвальда—Летникова (2.2.3) и свободен от условия периодичности, которое накладывается на решение, если его искать методом Фурье. Операторы дробных производных не обладают свойством дивергентности, поэтому их непосредственная замена механическими квадратурами приводит к нарушению закона сохранения переносимой субстанции. Для построения вычислительных алгоритмов, обладающих свойством консервативности, уравнение дробной диффузии (2.3.2) необходимо представить в потоковом виде:

$$\begin{cases} \frac{C_i^{n+1} - C_i^n}{\tau} = \frac{(1+\beta)}{2} L_i \bar{C}^n + \frac{(1-\beta)}{2} R_i \bar{C}^n, \\ L_i \bar{C}^n = \frac{1}{h} \left({}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n - {}^{+\alpha}F_{i-1/2}^n \right), \\ R_i \bar{C}^n = \frac{1}{h} \left({}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n - {}^{-\alpha}F_{i-1/2}^n \right), \quad (1 \leq \alpha \leq 2), \quad (-1 \leq \beta \leq 1). \end{cases} \quad (2.3.5)$$

Дробные потоки F представляют собой соответствующие дробные производные степени $(\alpha - 1)$ и вычисляются согласно определению дробной производной Грюнвальда—Летникова. Характерной особенностью дискретных аналогов операторов дробных потоков является то, что для их вычисления необходимо привлекать все без исключения узлы расчетной сетки на текущем временном слое. В отличие от сеточных операторов обычной диффузии сеточные операторы дробной диффузии являются нелокальными.

Таким образом, операторы R и L при $\alpha \neq 1, 2$ представляют собой полнотью заполненные треугольные матрицы с единичными элементами, прилегающими к главным диагоналям. Например, оператор L имеет вид

$$L = \frac{1}{h^\alpha} \begin{pmatrix} \theta_1 & 1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ \theta_3 & \theta_2 & \theta_1 & 1 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \theta_{N-1} & \theta_{N-2} & \dots & \theta_2 & \theta_1 & 1 \\ \theta_N & \theta_{N-1} & \theta_{N-2} & \dots & \theta_2 & \theta_1 \end{pmatrix}. \quad (2.3.6)$$

Коэффициенты θ_k связаны рекуррентным соотношением

$$\theta_{k+1} = -\frac{\theta_k (\alpha - k)}{k + 1}, \quad \theta_0 = 1. \quad (2.3.7)$$

Эта схема аппроксимирует исходное уравнение (2.3.2) с первым порядком по h и τ и является устойчивой при $\alpha\tau/h^\alpha \leq 1$. При $\alpha \sim 2$ это условие оказывается весьма обременительным, и для его смягчения предложено главную диагональ и два прилегающих к ней коэффициента дискретного оператора перехода вынести на новый временной слой. Получающаяся при этом система линейных уравнений решается методом трехточечной прогонки [29]. Теоретический анализ и тестовые расчеты показывают, что такой частично неявный алгоритм оказывается безусловно устойчивым и

сохраняет свойство консервативности и первый порядок аппроксимации по времени. Он, в частности, может быть использован для решения крайних стационарных задач методом установления.

2.3.3. Метод сплайн-аппроксимаций

Необходимость повышения порядка аппроксимации по пространству вызвана тем, что разностная схема Грюнвальда—Летникова (первого порядка) недостаточно точно описывает поведение профиля концентрации для близких к единице значений параметра дробности α . Увеличение числа узлов (или уменьшение шага расчетной сетки h) частично решает проблему, но приводит к существенному увеличению вычислительных затрат.

В определение Римана—Лиувилля (2.2.5) входит интеграл, который может быть численно вычислен с любой заданной точностью. Для получения второго порядка аппроксимации по пространственной переменной дробные потоки, относящиеся к серединам расчетных ячеек, следует аппроксимировать с третьим порядком методом трапеций.

Представим уравнение дробной диффузии (2.3.2) в разностном потоковом виде (2.3.5). Рассмотрим поток ${}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n$. Согласно определению Римана—Лиувилля (2.2.5) при $m=1$ после разбиения входящего в него интеграла на сумму интегралов по отрезкам, ограниченными узлами расчетной сетки, получим

$${}^{+\alpha}F_{i+1/2}^n = \frac{1}{\Gamma(2-\alpha)} \frac{d}{dx_{i+1/2}} \left[\sum_{k=0}^{i-1} \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{C(t)dt}{(x_{i+1/2}-t)^{\alpha-1}} + \int_{x_i}^{x_{i+1/2}} \frac{C(t)dt}{(x_{i+1/2}-t)^{\alpha-1}} \right], \quad (2.3.8)$$

$$x_0 = a.$$

Совершенно аналогично записывается поток ${}^{-\alpha}F_{i+1/2}^n$. Для получения метода второго порядка аппроксимации по h достаточно представить подынтегральную функцию $C(x)$ в виде непрерывной кусочно-линейной функции $\beta_k x + \gamma_k$, где $x \in [x_k, x_{k+1}]$, $\beta_k = (C_{k+1} - C_k)/h$, $\gamma_k = C_k - \beta_k x_k$, после чего интегрирование в формуле (2.3.8) можно произвести аналитически.

Соответствующие матрицы \mathbf{L} и \mathbf{R} во многом похожи на матрицы, полученные конечно-разностным методом Грюнвальда—Летникова в предыдущем разделе. Они отличаются только коэффициентами θ_k , которые имеют более сложный вид:

$$\theta_0 = \frac{1}{(2-\alpha)\Gamma(2-\alpha)2^{2-\alpha}}, \quad \theta_1 = \theta_0(3^{2-\alpha} - 2),$$

$$\theta_k = \theta_0 \left[(2k-3)^{2-\alpha} - 2(2k-1)^{2-\alpha} + (2k+1)^{2-\alpha} \right], \quad (2.3.9)$$

$$k \geq 2, \quad 1 \leq \alpha < 2.$$

Таким образом, мы получили численный метод второго порядка аппроксимации по пространству и первого порядка по времени. Схема, как показывает анализ, также устойчива при $\alpha\tau/h^\alpha \leq 1$. Для придания алгоритму свойства безусловной устойчивости достаточно, как и в предыдущем случае, сделать его частично неявным.

Численные решения уравнения диффузии с дробной производной по пространству, полученные методом Фурье при различных параметрах α , β и t , представлены на **рис. 2.3.1** и **2.3.2**. Влияние параметра дробности α на решение продемонстрировано на **рис. 2.3.1**, динамика изменения профиля концентрации с течением времени t и с учетом скошенности β — на **рис. 2.3.2**.

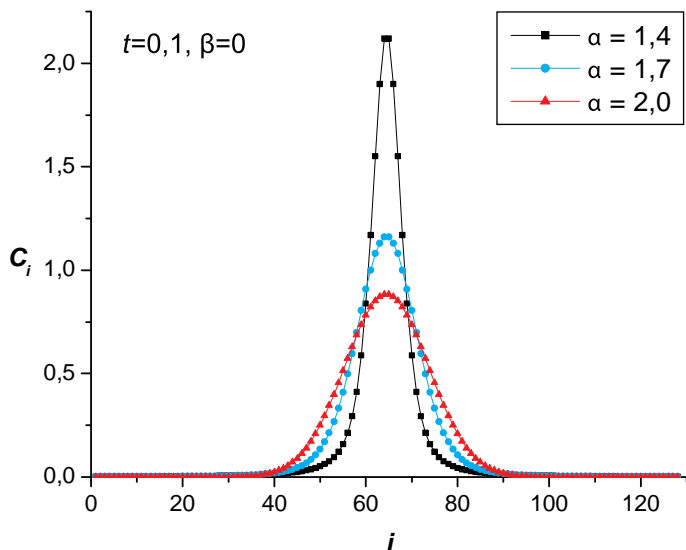


Рис. 2.3.1. Графики решений уравнения диффузии с дробной производной по пространству при различных параметрах α

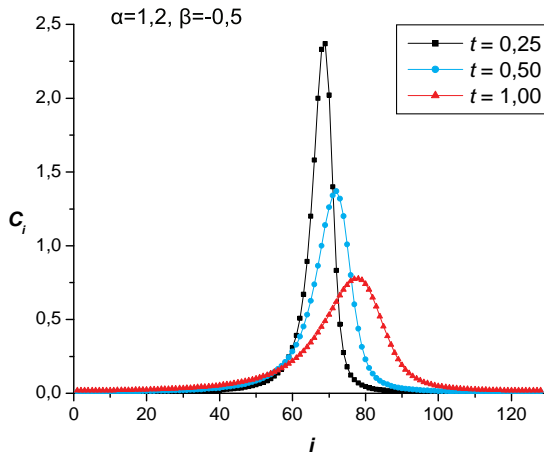


Рис. 2.3.2. Графики решений уравнения диффузии с дробной производной по пространству при различных параметрах t

На **рис. 2.3.3** приведены распределения, полученные с помощью различных численных методов. При малых значениях параметра α решение, полученное при помощи разностной схемы первого порядка аппроксимации по пространству (конечно-разностный метод), заметно отличается от профиля, полученного достаточно точным методом Фурье. Распределение, вычисленное методом сплайн-аппроксимаций, практически совпадает с профилем Фурье.

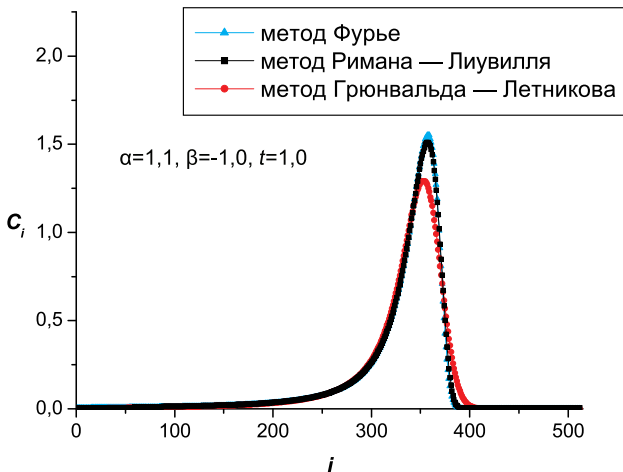


Рис. 2.3.3. Графики решений уравнения диффузии с дробной производной по пространству, полученные при помощи методов Фурье, Римана — Лиувилля и Грюнвальда — Летникова

2.3.4. Вариант двумерной модели с дробной производной по пространству

Распространение моделей с дробной производной на многомерный случай встречает значительные трудности. Нами реализована версия такой двумерной модели только для симметричного случая.

Рассмотрим уравнение диффузии с дробной производной по пространству в симметричном случае

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \frac{D}{2} \left(\frac{\partial^\alpha \phi}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial^\alpha \phi}{\partial (-x)^\alpha} \right) + \frac{D}{2} \left(\frac{\partial^\alpha \phi}{\partial y^\alpha} + \frac{\partial^\alpha \phi}{\partial (-y)^\alpha} \right). \quad (2.3.10)$$

Одно из возможных обобщений преобразования Фурье оператора, стоящего в его правой части, на двумерный случай можно записать следующим образом:

$$\frac{D}{2} \left(\frac{\partial^\alpha \phi}{\partial x^\alpha} + \frac{\partial^\alpha \phi}{\partial (-x)^\alpha} \right) + \frac{D}{2} \left(\frac{\partial^\alpha \phi}{\partial y^\alpha} + \frac{\partial^\alpha \phi}{\partial (-y)^\alpha} \right) \Rightarrow D(k_x^\alpha + k_y^\alpha) \cos\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right).$$

Рассмотрим, таким образом, в пространстве Фурье в двумерном симметричном случае уравнение дробной диффузии в следующем виде:

$$\frac{\partial \phi}{\partial t}(\vec{k}) = L\phi(\vec{k}), \quad L = D(k_x^\alpha + k_y^\alpha) \cos\left(\frac{\pi\alpha}{2}\right).$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\phi(\vec{k}, t) = \phi(\vec{k}, t_0) \exp\{L \cdot t\}.$$

Применение обратного преобразования Фурье приведет к искомой функции $\phi(x, y)$ — решению уравнения дробной диффузии в симметричном двумерном случае.

Численно данный метод был реализован с помощью стандартных процедур быстрого преобразования Фурье.

2.3.5. Сравнение стохастической модели и модели дробной диффузии

Проведено сравнение результатов моделирования распространения примеси с использованием одномерной модели дробной диффузии Римана—Лиувилля и одномерной стохастической модели [14].

Для одномерного случая результаты моделирования динамики распространения примеси по стохастической модели и разностного аналога интегро-дифференциальной модели с дробной производной практически совпадают.

Расчеты проводились при одинаковых шагах по времени и пространству. Нетрудно видеть что на практике даже для полностью несимметричного распределения при $\alpha = 1,5$ вполне достаточно использовать серию генераторов длиной 10 (рис. 2.3.4). Шаг по времени — 0,001. Поэтому уже на первый момент времени, представленный на рисунке, получаем практически строго устойчивое распределение.

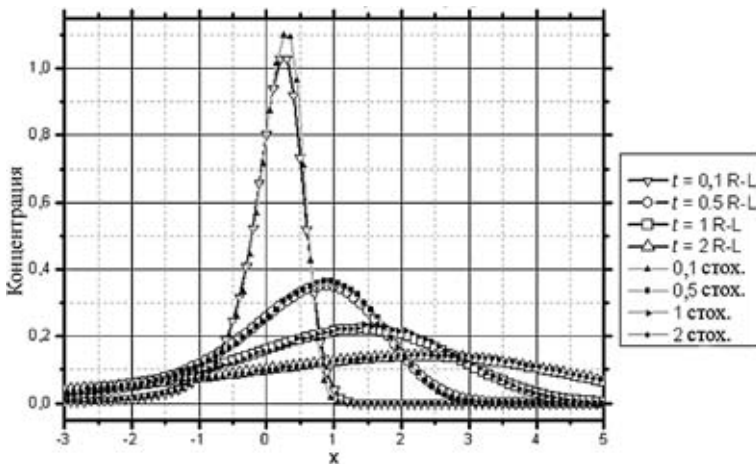


Рис. 2.3.4. Сравнение модели дробной диффузии и стохастической модели на разные моменты времени (R-L). Длина серии для стохастической модели (стох.) равна 10

Аналогичные результаты получены при сравнении результатов моделирования с использованием варианта разработанной симметричной двумерной модели с дробной производной и двумерной стохастической модели (модель А). Результаты моделирования по этим двум моделям практически совпадают [14].

Выводы по разделам 2.1—2.3

Простейшими математическими моделями переноса в сильнонеоднородных средах, характеризующихся отсутствием пространственного масштаба, являются модели случайного блуждания частиц, в которых среда представляется однородной, а ее стохастические свойства проявляются в выборе функции распределения приращений координат блуждающей

частицы (CTRM). Если приращения координат происходят через одинаковые промежутки времени и функция приращений имеет конечную дисперсию, то изменение со временем плотности пространственного распределения частиц описывается классическим уравнением диффузии.

Если дисперсия приращений координат становится бесконечной, то в одномерном случае средняя плотность описывается уравнением дробной диффузии с оператором дробного пространственного дифференцирования, определяемым двумя параметрами, которые характеризуют функцию распределения. Это параметр α , задающий степенное убывание тяжелых хвостов, и параметр β , задающий степень асимметрии распределения. При $\alpha = 2$ распределение стремится к нормальному, при $\alpha = 1$ переходит в распределение Коши. При $\alpha < 2$ функция распределения приращений координат блуждающей частицы характеризуется не только бесконечной дисперсией, но и бесконечно большой средней величиной. И хотя в этом случае мы не можем получить устойчивые средние для каждой из частиц в отдельности, средние значения плотности частиц в заданной точке пространства остаются устойчивыми переменными и имеют привычный физический смысл.

Моделирование распространения примеси на основе уравнений дробной диффузии в многомерном случае и при наличии асимметрии в параметрах диффузии встречается с заметными трудностями. Кроме того, существует определенный скептицизм со стороны физиков по отношению к этому подходу — иногда его считают некой красивой, но малопонятной математической абстракцией.

Стохастический подход CTRM — более гибкий и прозрачный инструмент для моделирования процессов с неограниченной дисперсией. Однако и здесь существуют определенные трудности, связанные с созданием генераторов случайных величин, обладающих нужными свойствами.

В разделе 2.1 предложен и опробован один из возможных вариантов генератора случайных величин с тяжелыми хвостами в распределениях для всего диапазона изменчивости их параметров (генератор относится к классу так называемых аппроксимационных, основанных на использовании центральной предельной теоремы Гнеденко—Леви [8]) . На основе этого генератора разработана одномерная, двумерная и трехмерная стохастические модели распространения примеси, для которых характерна неограниченность дисперсии местоположения частиц примеси при разных реализациях процесса.

В разделе 2.3 проведено сравнение результатов решения одномерной и двумерной стохастических задач с расчетами, полученными на основе

интегро-дифференциальных уравнений дробной диффузии. Показано, что плотность вероятности распределения частиц в стохастической модели совпадает с решением уравнений дробной диффузии.

Таким образом, использование методов СТМ и аппарата дробных производных приводит к одним и тем же результатам. Однако с вычислительной точки зрения метод прямого статистического моделирования распространения консервативной примеси в сильнонеоднородных средах СТМ в случае более одного пространственного измерения имеет заметные преимущества перед методом численного решения уравнений дробной диффузии. Кроме того, он отличается большей гибкостью с точки зрения возможностей учета дополнительных физических факторов, таких как, например, анизотропия, обуславливаемая наличием силы тяжести.

2.4. Физические приближения и дифференциальные математические модели просачивания влаги сквозь ненасыщенную трещиноватую геологическую среду с низкой проницаемостью

Математические модели, описывающие динамику многокомпонентных сред в пористых и трещиноватых геологических породах с учетом реальных уравнений состояния и термодинамических процессов в настоящее время хорошо известны и широко применяются при расчетах геотермальных источников и задач нефте- и газодобычи [30—35]. Несколько другой класс моделей используется при решении задач фильтрации промышленных и экологических загрязнений через зону неполного влагонасыщения в грунтовые воды [30—35]. Вычислительные методики, реализующие эти модели, также хорошо известны [34—49].

Общее для этих классов задач состоит в том, что результаты, полученные с точностью до 10%, с практической точки зрения являются вполне приемлемыми. Совершенно иные требования предъявляются к результатам анализа безопасности захоронения радиоактивных отходов. Здесь требуются другие постановки задач и новые методы их решения.

При анализе безопасности долговременного хранилища радионуклидов на полигоне в американском штате Невада (Yucca Mountain) возникает задача моделирования протечек в водоненасыщенном пласте вулканического туфа, обладающего малой проницаемостью. Многочисленные исследования

показывают, что стандартные гомогенизированные модели приводят к качественно неверным результатам. Причиной таких отклонений может служить фрактальный характер сетей трещин, по которым происходит просачивание влаги, изменяющий сам характер осредненного закона Дарси.

Чтобы построить новые математические модели, адекватно учитывающие это обстоятельство, можно использовать методологию вычислительного эксперимента. Для этого нужно научиться аккуратно решать обычные задачи просачивания в сильнонеоднородной среде, представляющей собой набор конечного числа взаимодействующих перколяционных решеток в почти непроницаемой матрице. Проводящие элементы каждой решетки образуют кластеры, характер распределения которых является случайным. Взаимодействие между кластерами разных решеток осуществляется посредством капиллярных сил. Замыкающим элементом модели служит однородная слабопроницаемая матрица.

Каждая из перколяционных решеток с номером $k = 1, \dots, n$ моделирует свой класс сетей трещин, характеризуется своими перколяционным параметром $0 \leq \eta_k \leq 1$, максимальной проницаемостью σ_k , пористостью m_k и строится следующим образом: исходная область разбивается на регулярные прямоугольные ячейки со сторонами h_x, h_y, h_z , и на каждой грани элементарной ячейки разыгрывается однородно распределенная на единичном отрезке случайная величина χ_k . Если $\chi_k \leq \eta_k$, то проницаемость этой грани полагается равной σ_k , в противном случае — равной нулю.

В разделах 2.5 и 2.6 предлагаются новый эффективный вычислительный алгоритм, позволяющий решать уравнения просачивания на каждой из таких перколяционных решеток, и общая модель их взаимодействия друг с другом и с несущей слабопроницаемой матрицей.

2.4.1. Введение в теорию перколяции

Рассмотрим процесс случайного распространения жидкости через среду. В обычных процессах диффузии «случайность» — не что иное, как случайные блуждания частиц жидкости. Примером может служить нерегулярное тепловое движение молекул жидкости. Другой пример случайного процесса — протекание, или перколяционный процесс [30; 50] — в этом случае жидкость в среде ведет себя, как вода в перколяторе (кофеварке).

Процессы диффузии, такие как распространение растворимого вещества в растворителе или движение электронов в полупроводнике, хорошо понятны. Диффундирующая частица может достигать любой точки в среде. Иначе обстоит дело в случае протекания.

Наиболее характерная особенность перколяционных процессов — существование порога протекания, ниже которого процесс распространения жидкости ограничен конечной областью среды. В качестве примера Бродбент и Хаммерсли [51] рассмотрели распространение заболевания деревьев, при котором те сбрасывают листву и перестают расти, в саду, где деревья посажены в узлах квадратной решетки. Если расстояния между деревьями возрастают настолько, что вероятность заражения соседнего дерева падает ниже критического значения p_c , заболевание по саду не распространяется. Порогом протекания для этой задачи служит вероятность $p_c = 0,59275$ для протекания от узла к узлу квадратной решетки. Другой пример — просачивание воды или радиоактивных отходов в трещины и разломы горной породы. Вопрос заключается в том, останется ли вода локализованной в каком-то объеме или будет распространяться все дальше и дальше. И в этой задаче можно ожидать, что существует критический порог концентрации трещин. Величину порога протекания можно определить с помощью численного моделирования.

Проводимость среды (коэффициент проницаемости) существенно зависит от структуры ее порового пространства. В случае хаотического распределения проводящих каналов в среде топология порового пространства может быть описана с использованием теории перколяции. О перколяционных процессах существует обширная литература. Наглядное введение в теорию протекания изложено в работе Штауффера [52]. Аарони [53] и Аарони и Штауффер [54] дали точное изложение теории и обсудили несколько важных приложений. Более ранние обзоры Шанте и Киркпатрика [55], Киркпатрика [56], Штауффера [57] и Эссама [58] содержат много существенных деталей. Интересные сообщения о последних достижениях в теории протекания и обширная библиография содержатся в трудах нескольких конференций (см., например, публикации под редакцией Дейчера и др. [59], Пинна и Шелторпа [60], Энглмэна и Егера [61], Пинна и Ристе [62]). Приведем лишь основные положения теории перколяции, необходимые в дальнейшем для построения моделей, описывающих проводимость среды.

Рассмотрим для определенности задачу о протекании по периодической решетке. В решетке имеются узлы и проводящие связи между ними. Очевидно, что если все связи в решетке разорваны (не проводят), то ее проводимость равна нулю. По мере роста концентрации проводящих связей они начинают соединяться между собой и образовывать кластеры — проводящие объединения связей. С некоторого порогового значения концентрации проводящих связей они начинают образовывать бесконечный проводящий кластер (БК), и проводимость решетки становится отличной

от нуля. Плотность БК и соответственно его проводимость увеличиваются по мере дальнейшего увеличения концентрации проводящих связей. Количественное описание порогового значения концентрации связей для различных типов решеток, а также зависимость проводимости решетки от концентрации связей также дает теория перколяции.

Таким образом, теория перколяции — наука о формировании областей связности элементов с определенными свойствами (кластеров) при условии, что связь каждого элемента с соседями носит случайный характер (но осуществляется вполне определенным способом). Очевидно, что явления, описываемые теорией перколяции, относятся к разряду так называемых критических явлений, которые характеризуются особой критической точкой, в которой наиболее важное с точки зрения рассматриваемого процесса свойство системы качественно меняется. Образование БК и есть по существу фазовый переход второго рода, характеризуемый с количественной стороны набором универсальных критических показателей. Универсальный характер этих показателей заключается в том, что они не зависят от конкретного вида модели, т. е. типа решетки, а определяются лишь размерностью пространства. Этот основной постулат теории перколяции базируется на анализе огромного количества результатов численного моделирования процессов формирования БК на решетках различного типа. В простейших случаях, например в случае плоской квадратной решетки, могут быть получены и аналитические решения [30].

В теории перколяции показано также, что, несмотря на случайный характер распределения проводящих связей (узлов) в решетке, имеет место вполне определенное пороговое значение величины вероятности проводимости связи, при котором в бесконечной решетке возникает проводимость. Это пороговое значение зависит лишь от типа решетки и размерности задачи и не зависит от конкретной реализации распределения проводящих связей в решетке. В конечной системе порог протекания зависит от конкретной реализации распределения проводящих связей, т. е. является величиной случайной. С увеличением размеров решетки величина флуктуации положения порога протекания уменьшается, и значение порога протекания стремится к величине, предсказываемой теорией перколяции. При этом δ — ширина критической области, в пределы которой с подавляющей вероятностью попадают значения порога протекания решетки конечного размера, — уменьшается по закону $\delta \cong C/N^{-\nu D}$, где N — число узлов в решетке; D — размерность задачи; C — численный коэффициент ($\approx 1/2$); ν — критический индекс (индекс радиуса корреляции), зависящий от размерности задачи, который будет определен ниже.

Поскольку численное моделирование проводится на решетках конечного размера, результаты теории перколяции справедливы лишь для решеток, содержащих достаточно большое число узлов ($N \approx 10^4$), когда размеры решетки можно считать макроскопическими по сравнению с размерами элементарной ячейки. При этом порог протекания определяется как предел, к которому стремится среднее значения порога протекания при увеличении числа узлов решетки. Приведем кратко основные результаты теории перколяции.

Порог протекания. Пусть вероятность проводимости каждой связи между узлами характеризуется величиной P^b (bonds), а вероятность проводимости узлов — P^s (spheres). Тогда в случае выполнения условия $P^b \geq P_c^b$, где P_c^b — пороговое значение вероятности проводимости связи, в решетке образуется БК. Если $P^b < P_c^b$, БК не образуется, и проводимость решетки равна нулю. Величина P_c^b зависит от числа ближайших соседей узла в решетке z и от размерности последней D , т. е. от типа решетки. С хорошей точностью можно записать следующий инвариант:

$$P_c^b z \approx D/(D-1).$$

Значения z , P_c^b и $P_c^b z$ для различных типов решеток приведены в табл. 2.4.1.

Таблица 2.4.1. Число ближайших соседей z , пороговые значения вероятности проводимости связи P_c^b и инвариант $P_c^b z$ для различных типов решетки

Тип решетки	z	P_c^b	$P_c^b z$
Плоская:			
квадратная	4	0,5	2,0
треугольная	6	0,35	2,1
шестиугольная	3	0,75	2,0
Объемная:			
простая кубическая	6	0,25	1,5
объемноцентрированная кубическая	8	0,18	1,4
гранеццентрированная кубическая	12	0,12	1,4
типа алмаза	4	0,39	1,6

Пример плоской треугольной перколяционной решетки со случайными проводящими связями представлен на **рис. 2.4.1.**

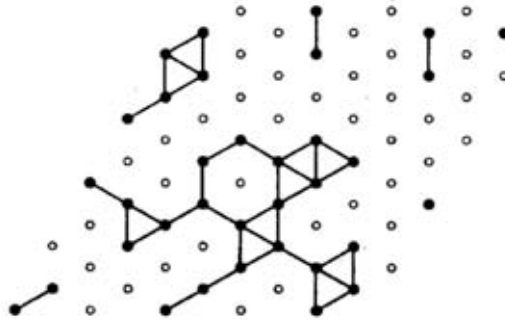


Рис. 2.4.1. Треугольная перколяционная решетка и случайные проводящие связи

Аналогичная картина наблюдается и при рассмотрении вопроса о проводимости решетки с точки зрения задачи проводимости узлов (**рис. 2.4.2**). Если вероятность проводимости узла P^s удовлетворяет условию $P^s \geq P_c^s$, где P_c^s — пороговое значение вероятности проводимости узла, то в решетке образуется БК.

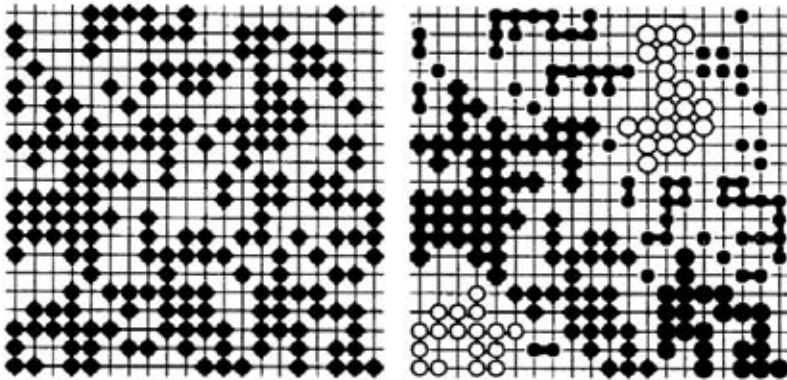


Рис. 2.4.2. Проводимость решетки с точки зрения задачи проводимости узлов.

Слева: квадратная решетка, половина узлов которой занята «порами».

Справа: связанные образования, или кластеры. Наибольшие кластеры для наглядности изображены другими символами пор.

Решетка состоит из $L \times L$ узлов с $L = 20$

Величина P_c^s зависит от f — коэффициента заполнения, т. е. от типа решетки. Коэффициент заполнения равен доле объема, занятого шарами,

построенными вокруг каждого узла решетки и имеющими радиус, равный половине расстояния до ближайшего соседа. С точностью до 10—15% имеет место инвариант:

$$P_c^s f = \begin{cases} 0,16 & \text{в трехмерном случае,} \\ 0,50 & \text{в двумерном случае.} \end{cases}$$

Значения f , P_c^s и $P_c^s f$ для различных типов решеток приведены в табл. 2.4.2.

Таблица 2.4.2. Коэффициенты заполнения f , пороговые значения вероятности проводимости узла P_c^s и инвариант $P_c^s f$ для различных типов решеток

Тип решетки	f	P_c^s	$P_c^s f$
Плоская:			
квадратная	0,79	0,59	0,47
треугольная	0,91	0,50	0,46
шестиугольная	0,61	0,70	0,43
Объемная:			
простая кубическая	0,52	0,31	0,16
объемноцентрированная кубическая	0,68	0,25	0,17
гранецентрированная кубическая	0,74	0,20	0,15
типа алмаза	0,34	0,43	0,15

Структура бесконечного кластера. Проводимость решетки существенно зависит от структуры БК. Участки БК делятся на «скелет» и «мертвые концы». Считается, что точка принадлежит скелету БК, если по крайней мере два пути, выходящие из нее, позволяют уйти на бесконечное расстояние. Если имеется только один путь, то точка принадлежит мертвому концу. Модель структуры БК была независимо предложена Б. И. Шкловским и П. Де Женом. Согласно этой модели структуру скелета БК можно представить в виде неправильной решетки с характерным периодом, равным R — радиусу корреляции БК, величина которого определяется выражением

$$R \sim (P^b - P_c^b)^{-\nu}, \quad (2.4.1)$$

где индекс радиуса корреляции

$$\nu = \begin{cases} 0,90 & \text{в трехмерной задаче,} \\ 1,33 & \text{в двумерной задаче.} \end{cases}$$

Как показали численные эксперименты, соотношение (2.4.1) справедливо и для задачи узлов. При этом индекс ν имеет то же значение, что и в задаче связей.

Проводимость вблизи порога протекания. В рамках теории перколяции показано, что с ростом вероятности P^b или P^s проводимость БК вблизи порога протекания растет по закону

$$K \sim (P^b - P_c^b)^d,$$

где величина d определяется только размерностью задачи:

$$d = \begin{cases} 1,7 \pm 0,02, & D = 3, \\ 1,3 \pm 0,02, & D = 2. \end{cases}$$

Численный эксперимент показывает, что зависимость для K справедлива в интервале $P_c^b \leq P^b \leq P_c^b + \Delta P^b$, где $\Delta P^b < 0,1$.

В интервале $P_c^b + \Delta P^b \leq P^b < 1$ проводимость решетки хорошо описывается формулой, полученной в рамках модели «эффективной среды» [63]:

$$K = K_0 \left[1 - (1 - P^b) / (1 - 2/z) \right],$$

где K_0 — максимальная проводимость решетки в случае, когда в ней отсутствуют разорванные связи ($P^b = 1$). Аналогичное утверждение справедливо и в отношении величины P^s , если рассматривать задачу узлов.

Модель Шкловского—Де Жена позволяет связать индекс d с индексом радиуса корреляции ν [30]:

$$d = \begin{cases} 2\nu & \text{в трехмерном случае,} \\ \nu & \text{в двумерном случае.} \end{cases}$$

2.4.2. Просачивание влаги в зоне аэрации

Просачивание влаги в пористую среду, заполненную воздухом, в изотермическом приближении может быть описано системой уравнений (К. Прусс [34; 49]):

$$m \frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div}(\bar{w}_w) = 0, \quad \bar{w}_w = \frac{\tilde{k}F_w(s)}{\mu_w \rho_w} [-\operatorname{grad}(p + p_c) + \rho_w \bar{g}], \quad (2.4.2)$$

где $m = m(\vec{r})$ — пористость; $s : s \in [s_0, 1]$ — влагонасыщенность; s_0 — невытесняемая водная фаза; \vec{w}_w — поток влаги; $\tilde{k} = \tilde{k}(\vec{r})$ — тензор проницаемости трещиновато-пористой среды; ρ_w — плотность воды; μ_w — кинематический коэффициент вязкости; $p_c = p_c(s)$ — капиллярное давление; p — равновесное давление в системе «газ — жидкость»; \vec{g} — ускорение свободного падения; $F_w(s)$ — функция относительной проницаемости.

Для моделирования проникновения влаги в толстых слоях вулканического туфа в [34; 49] предлагается использовать значения основных параметров и виды определяющих функций, приведенные в табл. 2.4.3.

Таблица 2.4.3. Основные параметры и виды определяющих функций

Параметр	Функция
Абсолютная проницаемость	$k = 10^{-9} \text{—} 10^{-7} \text{ м}^2$
Пористость	$m = 0,35$
Относительная проницаемость $F_w(s) = \sqrt{S^*} \left\{ 1 - \left(1 - [S^*]^{1/\lambda} \right)^\lambda \right\}^2$	$S^* = (S - S_0) / (1 - S_0)$; невытесняемая водная фаза $S_0 = 0,15$; $\lambda = 0,457$
Капиллярное давление $P_c = -(\rho g / a) \left([S^*]^{-1/\lambda} - 1 \right)^{1-\lambda}$	
Коэффициент усиления	$a = 50 \text{ м}^{-1}$
Начальная насыщенность водой	$S_0 = 0,15$
Плотность воды	$\rho_w = 998,3 \text{ кг/м}^3$
Вязкость воды	$\eta_w = \mu_w \rho_w = 1 \cdot 10^{-3} \text{ Па} \cdot \text{с}$
Вязкость воздуха	$\eta_a = \mu_a \rho_a = 1 \cdot 10^{-5} \text{ Па} \cdot \text{с}$

График функции $F_w(s)$ представлен на **рис. 2.4.3**. Видно, что функция является монотонно возрастающей и выпуклой вниз.

На **рис. 2.4.4** приведен график функции зависимости капиллярного давления $p_c(s)$.

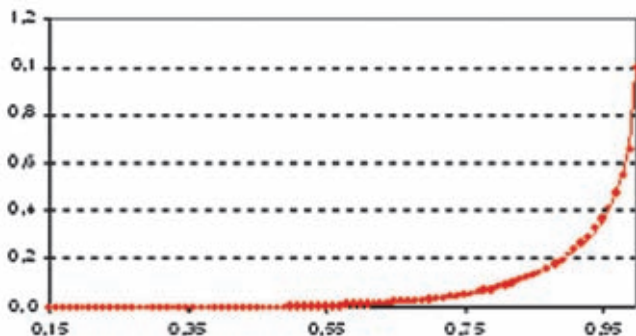


Рис. 2.4.3. График функции $F_w(s)$

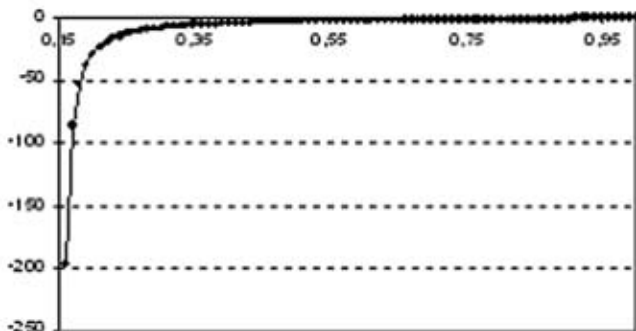


Рис. 2.4.4. Капиллярное давление $p_c(s)$ (в единицах $\rho g/a$)

Систему уравнений (2.4.2) удобно представить в виде квазилинейного уравнения конвекции-диффузии:

$$m(\vec{r}) \frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div} [\bar{k} F(s)] = \operatorname{div} [\gamma(s) \sigma(\vec{r}) \operatorname{grad}(s)], \quad (2.4.3)$$

где

$$\bar{k}(\vec{r}, t) = \sigma(\vec{r}) [\rho_w \vec{g} - \operatorname{grad}(p)], \quad \sigma(\vec{r}) = \frac{\tilde{k}}{\mu_w \rho_w}, \quad (2.4.4)$$

$$\gamma(s) = F(s) \partial p_c / \partial s.$$

На рис. 2.4.5 приведен график поведения функции $\gamma(s)$. Можно показать, что $\lim_{s \rightarrow 1} \gamma(s) = \infty$.

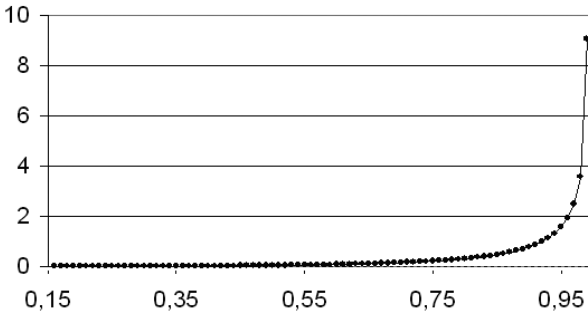


Рис. 2.4.5. График функции $\gamma(s)$

В уравнение (2.4.3) входит неизвестная величина равновесного давления p , для нахождения которой следовало бы привлечь уравнения, описывающие динамику вытесняемого воздуха:

$$\begin{aligned} m \frac{\partial(1-s)}{\partial t} + \operatorname{div}(\vec{w}_a) &= 0, \\ \vec{w}_a &= \frac{\tilde{k}F_a(1-s)}{\mu_a\rho_a} [-\operatorname{grad}(p) + \rho_a\vec{g}], \end{aligned} \quad (2.4.5)$$

где ρ_a — плотность воздуха; μ_a — коэффициент кинематической вязкости; $F_a(1-s)$ — функция относительной проницаемости воздушного потока.

Поскольку коэффициент динамической вязкости воздуха $\eta_a = \mu_a\rho_a$ на несколько порядков меньше коэффициента динамической вязкости воды $\eta_w = \mu_w\rho_w$, то в зоне аэрации при $s \ll 1$ давление в газовой фазе будет быстро выравниваться, и его можно считать постоянным и равным атмосферному. В этом случае уравнение (2.4.3) упростится и примет вид

$$m(\vec{r}) \frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div}[\sigma(\vec{r})\vec{g}F(s)] = \operatorname{div}[\gamma(s)\sigma(\vec{r})\operatorname{grad}(s)]. \quad (2.4.6)$$

В общем случае, когда выравнивание газового давления затруднено из-за близости водонасыщенности к единице, величина равновесного давления определяется из следующих соображений. Складывая два первых уравнения систем (2.4.2) и (2.4.5), получаем:

$$\operatorname{div}(\vec{w}_w + \vec{w}_a) = 0.$$

Отсюда с учетом остальных соотношений этих систем следует квазилинейное эллиптическое уравнение относительно неизвестной величины $p(\vec{r})$:

$$\operatorname{div} \left[\tilde{k}F_a(1-s)(\operatorname{grad}p - \rho_a \vec{g}) + \varepsilon \tilde{k}F_w(s)(\operatorname{grad}p - \rho_w \vec{g}) \right] = -\varepsilon Q(s), \quad (2.4.7)$$

где $\varepsilon = \eta_a/\eta_w = (\mu_a \rho_a)/(\mu_w \rho_w)$, $Q(s) = \operatorname{div} [\gamma(s) \tilde{k} \operatorname{grad}(s)]$.

2.4.3. Просачивание влаги в ничем не заполненную пористую среду

Из-за большой разницы плотностей воздуха и воды можно упростить постановку описанной выше задачи, предполагая, что изначально пористая среда ничем не заполнена, т. е. является пустой. В этом случае остаются одно нелинейное уравнение конвекции-диффузии (2.4.3) и условие несжимаемости жидкости, выражающееся в неравенстве

$$0 \leq s \leq 1. \quad (2.4.8)$$

При решении задачи (2.4.3) и (2.4.8) возникают два принципиально важных момента. Если решение таково, что ограничения (2.4.8) выполняются, то остается проблема аккуратного решения уравнения конвекции-диффузии при доминирующей адвекции. Если решение выходит за рамки этих ограничений, задача дополняется проблемой нахождения дополнительных сил реакции среды, удерживающих решение в заданных пределах.

Развитие методов численного решения дифференциальных уравнений с частными производными при наличии удерживающих связей типа (2.4.8) представляет собой актуальную научную задачу.

2.4.4. Просачивание влаги по перколяционным решеткам

Значительный методический интерес вызывает задача о просачивании влаги по перколяционной решетке. Пусть сплошная среда представляет собой регулярную кубическую решетку, каждая грань которой либо пропускает жидкость, либо нет. В первом случае коэффициент проницаемости равен σ_k , во втором — нулю. Какая из граней является проводящей, а какая нет, определяется случайным образом — разыгрывается равномерно распределенная на единичном отрезке случайная величина, и если ее значение меньше η_k : $0 < \eta_k < 1$, то проницаемость равна σ_k , в противном случае равна нулю.

Приведем некоторые примеры двумерных перколяционных решеток. Разобьем единичный квадрат в плоскости (x, y) регулярной прямоугольной решеткой с шагами $h_x = h_y = 1/50$.

На **рис. 2.4.6а** и **2.4.6б** приведены соответственно линии уровня проницаемости $(\sigma_x)_1$, $(\sigma_y)_1$ при $\eta_1 = 0,5$. На **рис. 2.4.6в** изображена область, ячейки которой соединены друг с другом проводящими гранями и которая может быть заполнена жидкостью при ее поступлении с левой границы квадрата при возможных перемещениях вниз, вверх и вправо. Видно, что в данной реализации не существует пути, по которому влага смогла бы распространиться от левой границы до правой.

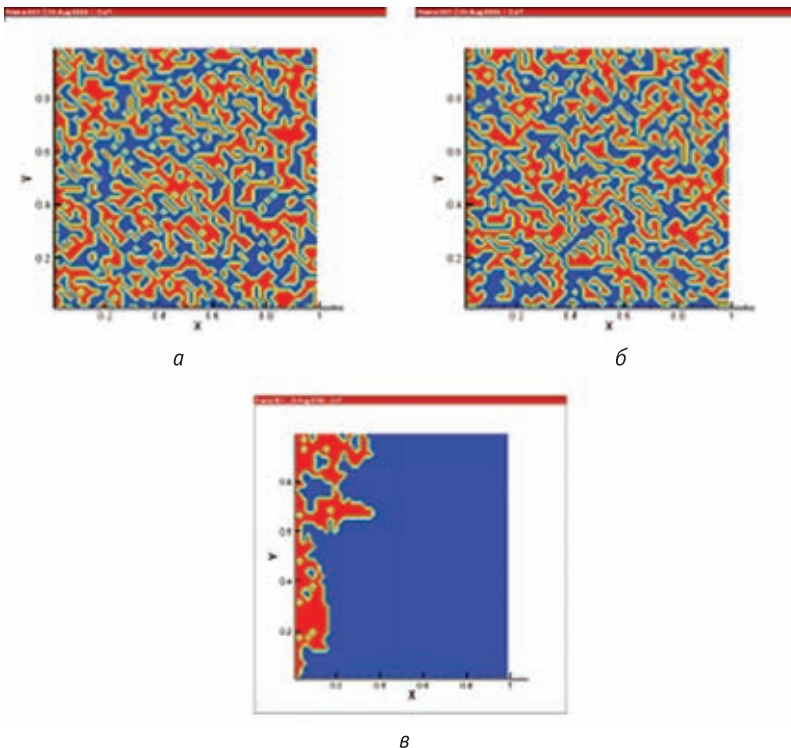


Рис. 2.4.6. Линии уровня проницаемости и область проницаемости при $\eta_1 = 0,5$:
а — изолинии x -компоненты коэффициента проницаемости;
б — изолинии y -компоненты коэффициента проницаемости;
в — область проницаемости

На **рис. 2.4.7а** и **2.4.7б** представлены линии уровня проницаемости $(\sigma_x)_2$, $(\sigma_y)_2$ при $\eta_2 = 0,55$. На **рис. 2.4.7в** изображены ячейки, соединенные друг с другом проводящими гранями, которые могут быть заполнены жидкостью при ее поступлении с левой границы квадрата. Предполагается, что из ячейки в ячейку жидкость может перемещаться только вниз, вверх и вправо. Видно, что существует проводящий кластер, соединяющий левую и правую стороны квадрата.

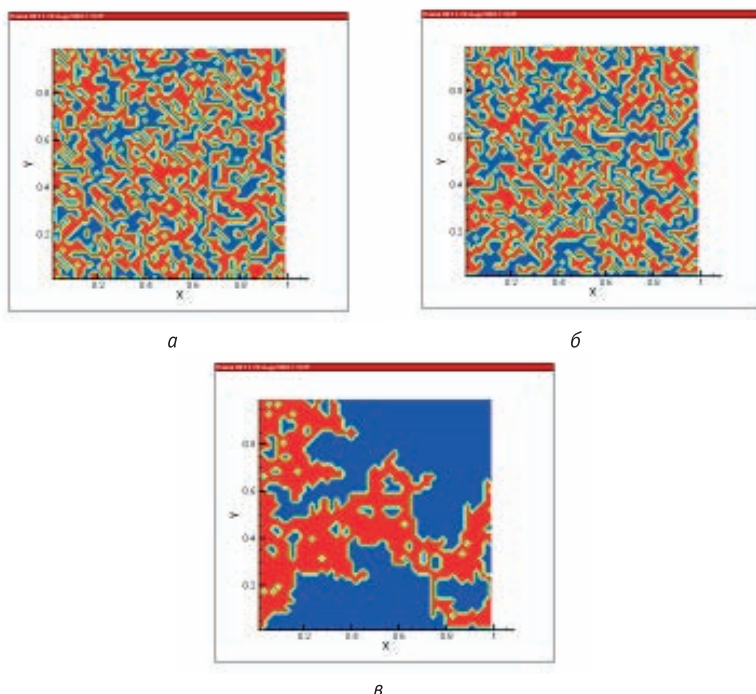


Рис. 2.4.7. Линии уровня проницаемости и область проницаемости при $\eta_1 = 0,55$:

- a* — изолинии x -компоненты коэффициента проницаемости;
- б* — изолинии y -компоненты коэффициента проницаемости;
- в* — область проницаемости

Как уже отмечалось, перколяционную решетку можно рассматривать как идеализированную модель системы относительно крупных трещин и считать, что поверхностное натяжение не играет заметной роли. В этом случае возникает проблема численного решения уравнения

$$m(\bar{r}) \frac{\partial s}{\partial t} + \operatorname{div} [\sigma(\bar{r}) \bar{g}F(s)] = 0 \quad (2.4.9)$$

при условии (2.4.8) на сильнонеоднородной пространственной области. Существующие численные методы, базирующиеся на известных разностных схемах, не справляются с особенностями этой задачи, поэтому в последние годы интенсивно развиваются новые подходы, получившие название перколяционных, которые еще далеки от совершенства. Развитие численных алгоритмов, описывающих динамику просачивания на перколяционных решетках, также является актуальной задачей.

Следует отметить, что приведенные на **рис. 2.4.6в** и **2.4.7в** кластеры «промокаемости» характеризуют только топологию проницаемости и не соответствуют динамической картине протекания, описываемой уравнением (2.4.9) при ограничении (2.4.8).

2.4.5. Взаимодействие между кластерами различных решеток и однородной слабопроницаемой матрицей

Сильнонеоднородную геологическую среду с сетями трещин в слабопроницаемой матрице, имеющих фрактальную природу, будем моделировать набором из n перколяционных решеток, взаимодействующих как друг с другом, так и с квазиоднородной матрицей.

Будем считать, что силы поверхностного натяжения не воздействует на динамику влаги в каждой из перколяционных решеток и сказываются только при обменных взаимодействиях между кластерами разных решеток. Обменные потоки между ячейками различных решеток будем считать пропорциональными разнице капиллярных давлений $P_c^{(j)}(s^{(j)})$ в этих ячейках с коэффициентом пропорциональности $\chi_{k,j}$. Система уравнений, описывающая такую модель, имеет вид

$$\begin{aligned} & m^{(k)}(\bar{r}) \frac{\partial s^{(k)}}{\partial t} + \operatorname{div} [\sigma^{(k)}(\bar{r}) \bar{g}F^{(k)}(s^{(k)})] = \\ & = \sum_{j=1}^n \chi_{k,j} [P_c^{(j)}(s^{(j)}) - P_c^{(k)}(s^{(k)})] + \chi_{k,M} [P_c^{(M)}(s^{(M)}) - P_c^{(k)}(s^{(k)})], \\ & m^{(M)} \frac{\partial s^{(M)}}{\partial t} + \operatorname{div} [\sigma^{(M)} \bar{g}F^{(M)}(s^{(M)})] = \\ & = \operatorname{div} [\gamma(s^{(M)}) \sigma^{(M)} \operatorname{grad}(s^{(M)})] + \sum_{j=1}^n \chi_{M,n} [P_c^{(j)}(s^{(j)}) - P_c^{(M)}(s^{(M)})], \end{aligned} \quad (2.4.10)$$

$$0 \leq s^{(j)} \leq 1, \quad j = 1, \dots, n, M, \quad (2.4.11)$$

где $s^{(j)}$, $s^{(M)}$, $\sigma^{(j)}$, $\sigma^{(M)}$, $m^{(j)}$, $m^{(M)}$ — влагосодержание, проницаемость и пористость каждого из континуумов и квазиоднородной матрицы соответственно.

2.4.6. Двойная пористость, двойная проницаемость

Особенности взаимодействия влаги, протекающей по системе трещин, с матрицей горной породы часто описывается двухконтинуальным приближением, когда сплошная среда представляется в виде двух взаимопроницающих континуумов со своими пористостями и проницаемостями, обмен между которыми определяется разницей в капиллярных давлениях. Система уравнений, описывающая протекание влаги в такой среде, имеет вид

$$\begin{aligned} m^{(1)}(\vec{r}) \frac{\partial s^{(1)}}{\partial t} + \operatorname{div} \left[\sigma^{(1)}(\vec{r}) \vec{g} F^{(1)}(s^{(1)}) \right] &= \\ = \chi(m^{(1)}, m^{(2)}) \left[P_c^{(2)}(s^{(2)}) - P_c^{(1)}(s^{(1)}) \right], \\ m^{(2)}(\vec{r}) \frac{\partial s^{(2)}}{\partial t} + \operatorname{div} \left[\sigma^{(2)}(\vec{r}) \vec{g} F^{(2)}(s^{(2)}) \right] &= \\ = \operatorname{div} \left[\gamma(s^{(2)}) \sigma^{(2)}(\vec{r}) \operatorname{grad}(s^{(2)}) \right] - \\ - \chi(m^{(1)}, m^{(2)}) \left[P_c^{(2)}(s^{(2)}) - P_c^{(1)}(s^{(1)}) \right]. \end{aligned} \quad (2.4.12)$$

Предполагается, что в первом континууме силы поверхностного натяжения незначительны, а обмен влагой между сетью трещин и твердой матрицей осуществляется за счет разницы в силах поверхностного натяжения, определяемых заданными функциями $P_c^{(1)}(s)$ и $P_c^{(2)}(s)$. Систему (2.4.12) следует дополнить обязательными удерживающими связями:

$$0 \leq s^{(1)} \leq 1, \quad 0 \leq s^{(2)} \leq 1. \quad (2.4.13)$$

2.4.7. Перколяционная решетка в квазиоднородной матрице

Основная вычислительная трудность при использовании модели двойной проницаемости — двойной пористости заключается в выполнении неравенств (2.4.13). Если систему трещин представить в виде перколяционной решетки, а матрицу основной породы — как среду с однородной прони-

цаемостью и пористостью, то такая идеализация, как показано ниже, позволяет отказаться от дорогостоящих итерационных алгоритмов, реализующих условие (2.4.13), и дает возможность существенно продвинуться в изучении протечек в сильнонеоднородных средах.

2.5. Одномерные модели просачивания на базе балансно-характеристических разностных схем

2.5.1. Одномерное приближение

Рассмотрим задачу протекания по одной изолированной перколяционной решетке. Ввиду ее относительной сложности начнем с самых простых случаев, постепенно усложняя постановку.

Если не учитывать силы поверхностного натяжения и считать, что ограничения (2.4.8) выполнены, уравнение (2.4.6) превращается в квазиодномерное:

$$m(x, y, z) \frac{\partial s}{\partial t} + g \rho_w \frac{\partial}{\partial x} [\sigma_x(x, y, z) F(s)] = 0. \quad (2.5.1)$$

При заданных (y, z) задача сводится к решению одномерного квазилинейного уравнения гиперболического типа

$$m(x) \frac{\partial s}{\partial t} + g \rho_w \frac{\partial}{\partial x} [\sigma_x(x) F_w(s)] = 0. \quad (2.5.2)$$

Характерной особенностью решений таких уравнения являются сильные и слабые разрывы, которые могут формироваться из гладких начальных условий.

2.5.2. Балансно-характеристическая разностная схема для простейшего нелинейного закона сохранения

Подвергнем уравнение (2.5.2) дальнейшему упрощению и в случае $\sigma(x) = \text{const}$, $m(x) = \text{const}$ представим его в виде скалярного закона сохранения

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} F(s) = 0, \quad (2.5.3)$$

где $F(s)$ — произвольная дифференцируемая функция. Будем рассматривать это уравнение в области $G: (x, t) \in [0, 1] \times [0, 1]$.

Методам численного решения уравнений типа (2.5.3) посвящено большое количество публикаций [37—41; 43—48; 64—71]. Остановимся на так называемом балансно-характеристическом подходе.

Наряду с дивергентной формой (2.5.3) исходное уравнение можно записать и в «характеристической» форме

$$\frac{\partial s}{\partial t} + c(s) \frac{\partial s}{\partial x} = 0, \quad c(s) = \frac{\partial F(s)}{\partial s}, \quad (2.5.4)$$

которая также будет использоваться для построения вычислительного алгоритма.

В области G введем равномерную расчетную сетку с шагами h, τ по пространственной и временной переменным соответственно. К узлам этой сетки будем относить сеточные величины s_i^n , которые будем называть потоковыми, а к центрам горизонтальных граней расчетных ячеек — сеточные величины $S_{i+1/2}^n$, которые будем называть консервативными.

Полагая значения консервативных и потоковых величин на текущем слое известными, аппроксимируем уравнение (2.5.3) дивергентной разностной схемой:

$$\frac{S_{i+1/2}^{n+1} - S_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{1}{h} \left[\frac{F(s_{i+1}^{n+1}) + F(s_{i+1}^n)}{2} - \frac{F(s_i^{n+1}) + F(s_i^n)}{2} \right] = 0. \quad (2.5.5)$$

Нетрудно видеть, что на достаточно гладких функциях эта разностная схема аппроксимирует исходное уравнение со вторым порядком как по времени, так и по пространственной переменной.

Чтобы по схеме (2.5.5) вычислить новые значения консервативных переменных $S_{i+1/2}^{n+1}$, необходимо знать значения консервативных переменных на новом временном слое s_i^{n+1} . Для нахождения последних вычислим сначала промежуточные значения консервативных переменных $S_{i+1/2}^{n+1/2}$ по явной консервативной разностной схеме

$$\frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \frac{F(s_{i+1}^n) - F(s_i^n)}{h} = 0, \quad (2.5.6)$$

аппроксимирующей исходное уравнение со вторым порядком по пространству и с первым порядком по времени. Следует отметить, что определяемые этим уравнением величины $S_{i+1/2}^{n+1/2}$ вычисляются со вторым порядком точности по времени и с третьим порядком по пространству.

Для каждого узла с номером i вычислим прикидочные значения потоковых переменных по формулам линейной экстраполяции:

$$(\tilde{s}_L)_i^{n+1} = 2S_{i-1/2}^{n+1/2} - s_{i-1}^n, \quad (\tilde{s}_R)_i^{n+1} = 2S_{i+1/2}^{n+1/2} - s_{i+1}^n, \quad (2.5.7)$$

обеспечивающие на гладких решениях второй порядок точности.

Если характеристика приходит в узел $(i, j+1)$ со стороны левой расчетной ячейки и величина шага по времени такова, что характеристика пересекает нижнюю грань ячейки, то из характеристического представления исходного уравнения (2.5.4) следует, что для точного решения должен выполняться принцип максимума:

$$s(x_i, t_{n+1}) \leq \max_{x \in [x_{i-1}, x_i]}(s), \quad s(x_i, t_{n+1}) \geq \min_{x \in [x_{i-1}, x_i]}(s). \quad (2.5.8)$$

Если характеристика приходит со стороны правой ячейки, то принцип максимума дает

$$s(x_i, t_{n+1}) \leq \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]}(s), \quad s(x_i, t_{n+1}) \geq \min_{x \in [x_i, x_{i+1}]}(s). \quad (2.5.9)$$

Для сеточных функций будем полагать, что

$$\begin{aligned} \max_{x \in [x_{i-1}, x_i]}(s) &= \max(s_{i-1}^n, s_i^n), & \min_{x \in [x_{i-1}, x_i]}(s) &= \min(s_{i-1}^n, s_i^n), \\ \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]}(s) &= \max(s_i^n, s_{i+1}^n), & \min_{x \in [x_i, x_{i+1}]}(s) &= \min(s_i^n, s_{i+1}^n). \end{aligned} \quad (2.5.10)$$

Прикидочные значения потоковых переменных, вычисленные по формулам линейной экстраполяции (2.5.7), не обязаны удовлетворять принципу максимума, поэтому их следует подвергнуть нелинейной коррекции:

$$(s_L)_i^{n+1} = \begin{cases} (\tilde{s}_L)_i^{n+1}, & \text{если } \min(s_{i-1}^n, s_i^n) \leq (\tilde{s}_L)_i^{n+1} \leq \max(s_{i-1}^n, s_i^n), \\ \min(s_{i-1}^n, s_i^n), & \text{если } (\tilde{s}_L)_i^{n+1} < \min(s_{i-1}^n, s_i^n), \\ \max(s_{i-1}^n, s_i^n), & \text{если } (\tilde{s}_L)_i^{n+1} > \max(s_{i-1}^n, s_i^n). \end{cases} \quad (2.5.11)$$

$$(s_R)_i^{n+1} = \begin{cases} (\tilde{s}_R)_i^{n+1}, & \text{если } \min(s_i^n, s_{i+1}^n) \leq (\tilde{s}_R)_i^{n+1} \leq \max(s_i^n, s_{i+1}^n), \\ \min(s_i^n, s_{i+1}^n), & \text{если } (\tilde{s}_R)_i^{n+1} < \min(s_i^n, s_{i+1}^n), \\ \max(s_i^n, s_{i+1}^n), & \text{если } (\tilde{s}_R)_i^{n+1} > \max(s_i^n, s_{i+1}^n). \end{cases} \quad (2.5.12)$$

Затем по двум откорректированным значениям потоковых переменных $(s_R)_i^{n+1}$, $(s_L)_i^{n+1}$ нужно вычислить окончательное значение s_i^{n+1} . Для этого найдем максимальные и минимальные значения потока на отрезке $[(s_R)_i^{n+1}, (s_L)_i^{n+1}]$:

$$\max F = \max_{s \in [(s_R)_i^{n+1}, (s_L)_i^{n+1}]} [F(s)], \quad \min F = \min_{s \in [(s_R)_i^{n+1}, (s_L)_i^{n+1}]} [F(s)]. \quad (2.5.13)$$

Обозначим через s_{\max} , s_{\min} те значения, при которых достигаются максимум и минимум потоков (2.5.13) соответственно. Окончательные величины s_i^{n+1} найдем из принципа наибоыстрейшего уменьшения (минимального роста) локальной вариации консервативной переменной:

$$s_i^{n+1} = \begin{cases} s_{\max}, & \text{если } S_{i-1/2}^{n+1/2} \geq S_{i+1/2}^{n+1/2}, \\ s_{\min}, & \text{если } S_{i-1/2}^{n+1/2} < S_{i+1/2}^{n+1/2}. \end{cases} \quad (2.5.14)$$

Зная величины потоковых переменных s_i^{n+1} , по разностной схеме (2.5.5) вычисляем новые значения консервативных переменных $S_{i+1/2}^{n+1}$. На этом вычислительный цикл заканчивается.

Следует отметить, что вместо схемы (2.5.5) для вычисления новых консервативных переменных можно использовать консервативную схему

$$\frac{S_{i+1/2}^{n+1} - S_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{F(s_{i+1}^{n+1}) - F(s_i^{n+1})}{h} = 0, \quad (2.5.15)$$

являющуюся линейной комбинацией схем (2.5.5) и (2.5.6).

2.5.3. Монотонность и вычислительная устойчивость

Принцип максимума в форме (2.5.8) и (2.5.9) обеспечивает монотонность численного решения, поскольку препятствует формированию новых локальных минимумов и максимумов. Как уже отмечалось, он справедлив, если характеристики, приходящие в узел $(i, n+1)$, пересекают одну из

нижних границ прилегающих к этому узлу расчетных ячеек. Если считать в первом приближении скорость распространения малых возмущений в каждой ячейке постоянной и равной

$$c_{i+1/2}^{n+1/2} = \left. \frac{\partial F}{\partial s} \right|_{S_{i+1/2}^n},$$

то это условие будет выполняться, если величина шага по времени будет удовлетворять условию Куранта—Фридрихса—Леви

$$\text{CFL} = \frac{\max |c_{i+1/2}^{n+1/2}| \tau}{h} \leq 1. \quad (2.5.16)$$

Таким образом, условие сохранения монотонности решения для балансно-характеристического алгоритма (2.5.16) совпадает с условием линейной устойчивости исходной схемы без коррекции потоков. При нарушении ограничения (2.5.16) в решении появляются нефизические разрывы, однако разбалтывания, характерного для алгоритмов без коррекции потоков, в этом случае не происходит.

2.5.4. Согласованное задание начальных данных

Для корректной работы описанного алгоритма необходимо согласованное задание консервативных $S_{i+1/2}^0$ и потоковых s_i^0 величин на начальном временном слое. Значения консервативных переменных нужно считать основными и задавать в первую очередь. Начальные значения потоковых переменных следует вычислять по заданным консервативным переменным по формулам распада разрыва, т. е. следующим образом. Будем считать величины консервативных переменных постоянными в пределах каждой расчетной ячейки, так что в узлах будут располагаться сильные разрывы. Вычислим потоки с каждой из прилегающих к данному узлу сторон и определим их максимальные и минимальные значения:

$$\max F = \max_{s \in [(s_{i+1/2}^0, (s_{i-1/2}^0)]} [F(s)], \quad \min F = \min_{s \in [(s_{i+1/2}^0, (s_{i-1/2}^0)]} [F(s)].$$

Обозначая через $(s_{\max})_i$ и $(s_{\min})_i$ величины, при которых достигаются максимумы и минимумы потоков, величины потоковых переменных в точках разрыва найдем из условия наивысшего уменьшения (минимального роста) локальной вариации консервативных переменных:

$$s_i^0 = \begin{cases} (s_{\max})_i, & \text{если } S_{i-1/2}^0 \geq S_{i+1/2}^0, \\ (s_{\min})_i, & \text{если } S_{i-1/2}^0 < S_{i+1/2}^0. \end{cases}$$

2.5.5. Примеры тестовых расчетов

1. Рассмотрим простейший случай линейной функции потоков $F(s) = cs$, $c = \text{const} > 0$. Для линейной функции потоков описанный выше алгоритм совпадает с алгоритмом «Кабаре» с коррекцией потоковых переменных [64—71]. В качестве начальных условий возьмем единичную ступеньку:

$$s(x, t_0) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \leq 0, \\ 1, & \text{если } 0 < x \leq 1, \\ 0, & \text{если } x > 1. \end{cases}$$

На **рис. 2.5.1** приведены результаты расчетов через $NT = 300$ шагов по времени, полученные по схеме «Кабаре» с коррекцией и трем TVD-схемам: с лимиттерами minmod , SuperBee и лимиттером В. Ф. Тишкина [64—71]. Последняя интересна тем, что в областях гладкости обеспечивает третий порядок точности. Расчет проводился на сетке с $h = 1/25$, с числом Куранта—Фридрихса—Леви $\text{CFL} = 0,4$.

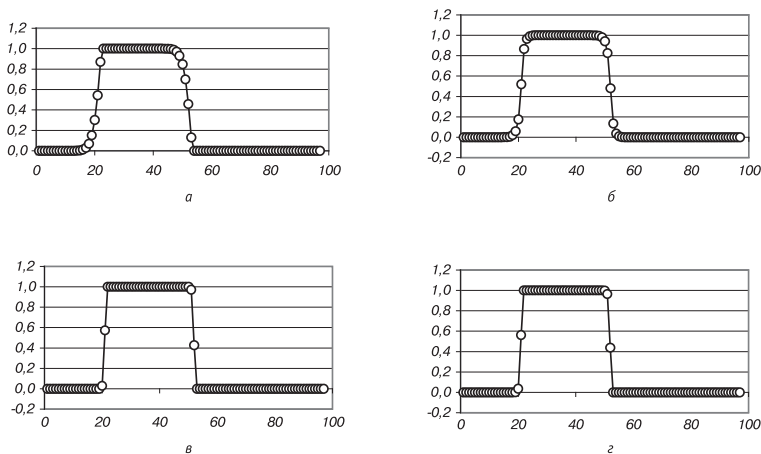


Рис. 2.5.1. Единичная ступенька. Результаты расчета: *а* — по схеме «Кабаре», *б* — по схеме TVD с лимиттером minmod , *в* — по схеме TVD с лимиттером SuperBee, *г* — по схеме TVD с лимиттером В. Ф. Тишкина

Видно, что схема «Кабаре» с коррекцией сопоставима с TVD-схемой с лимиттером minmod и несколько уступает остальным схемам. Однако ситуация кардинально меняется, если в качестве начальных данных взять гладкий профиль, например в виде положительной части синусоиды:

$$s(x, t_0) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \leq 0, \\ \sin(x), & \text{если } 0 < x \leq \pi, \\ 0, & \text{если } x > \pi. \end{cases}$$

На **рис. 2.5.2** приведены результаты расчетов через $NT = 1000$ шагов по времени, полученные по тем же схемам. Расчеты проводились на сетке с $h = \pi/50$ при $CFL = 0,4$.

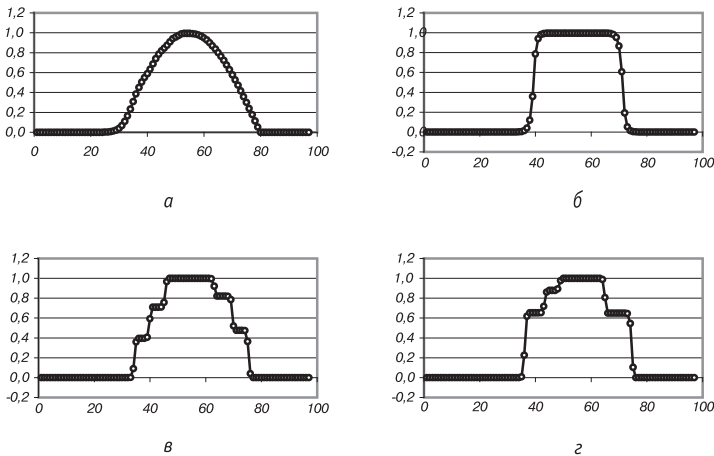


Рис. 2.5.2. Положительная часть синусоиды. Результаты расчета:
 а — по схеме «Кабаре», б — по схеме TVD с лимиттером minmod ,
 в — по схеме TVD с лимиттером SuperBee,
 г — по схеме TVD с лимиттером В. Ф. Тишкина

Здесь видны неоспоримые преимущества схемы «Кабаре» с коррекцией. Расчеты при других числах Куранта — Фридрихса — Леви показывают, что результаты изменяются слабо.

2. Случай простейшей выпуклой функции потоков: $F(s) = s^2/2$, $CFL = 0,45$. Результаты расчетов задачи Хопфа для начальных данных в виде единичной ступеньки, приведенные на **рис. 2.5.3**, показывают, что сильный разрыв практически не размывается, волна разрежения

воспроизводится точно и разрывы производных также не испытывают на себе аппроксимационного сглаживания.

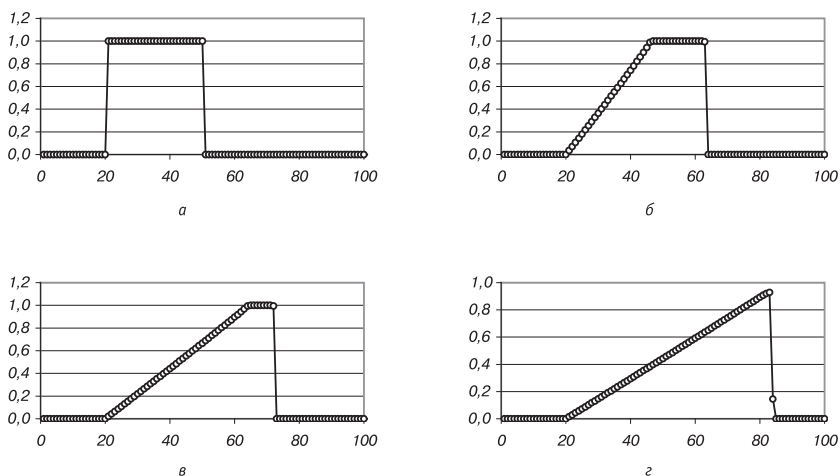


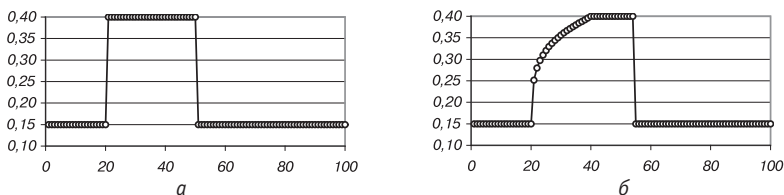
Рис. 2.5.3. Результаты расчета задачи с простейшей выпуклой функцией потоков: *а* — $NT = 0$, *б* — $NT = 60$, *в* — $NT = 100$, *г* — $NT = 150$

3. Реальная функция потоков (van Ganuchten):

$$F(s) = \sqrt{S^*} \left\{ 1 - \left[1 - (S^*)^{1/\lambda} \right]^\lambda \right\}^2, \quad S^* = \frac{s - s_0}{1 - s_0}, \quad (2.5.17)$$

$$\lambda = 0,457.$$

Как видно из **рис. 2.4.3**, эта функция, как и рассмотренная в предыдущем примере, является выпуклой, и поведение решения с начальными данными в виде единичной ступеньки, представленное на **рис. 2.5.4**, качественно близко поведению решения в задаче Хопфа. Разница состоит только в том, что волна разрежения не является прямой линией и по схеме второго порядка аппроксимации вычисляется с некоторой ошибкой, зависящей от густоты расчетной сетки.



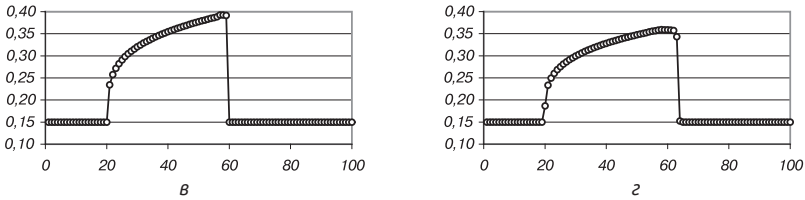


Рис. 2.5.4. Результаты расчета задачи с реальной функцией потоков:
 а — NT = 0, б — NT = 50, в — NT = 100, г — NT = 150

В дальнейшем для модельных задач мы часто будем использовать вместо функции van Ganuchten более простую функцию Хопфа.

4. Модельная невыпуклая функция Лаверетта—Бакли: $F(s) = \frac{s^2}{4s^2 + (1-s)^2}$. Для выпуклых функций сильный разрыв либо перемещается, как ударная волна, либо распадается в волну разрежения. Для невыпуклых функций ситуация оказывается более сложной, и ударные волны могут соседствовать с волнами разрежения. На рис. 2.5.5 приведены разные фазы решения модельной задачи Лаверетта — Бакли с начальными данными в виде единичной ступеньки. Видно, что решение всегда остается монотонным и ударные волны размазываются на одну расчетную ячейку.

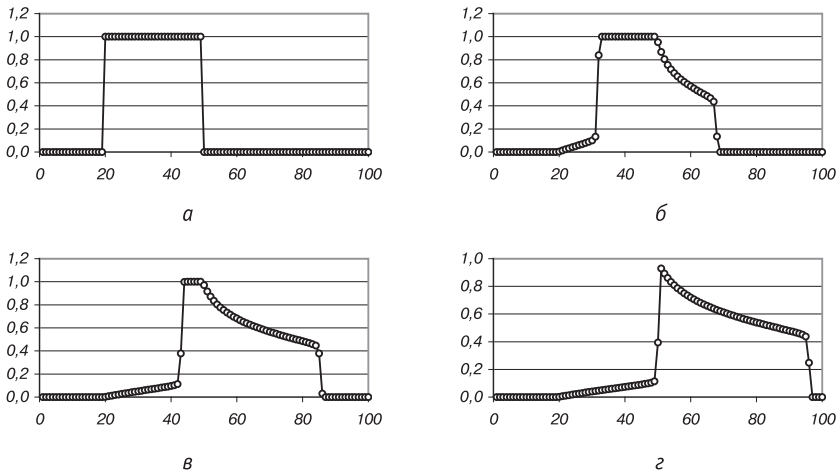


Рис. 2.5.5. Результаты расчета задачи с невыпуклой функцией Лаверетта—Бакли:
 а — NT = 0, б — NT = 50, в — NT = 100, г — NT = 130

5. Чтобы продемонстрировать возможности балансно-характеристического метода для задач с невыпуклыми потоками, рассмотрим задачу Коши для уравнения (2.5.3) при $F(\varphi) = \sin(\varphi)$ и с начальными данными:

$$\varphi(x, 0) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \leq 0, \\ \alpha\pi, & \text{если } 0 < x \leq 1, \\ 0, & \text{если } x > 1. \end{cases}$$

При $0 < \alpha \leq 0,5$ функция потоков является выпуклой, а скорость звука неотрицательной. В этом случае $[\varphi_{\max}]_{i+1}^{n+1} = (\varphi_{i+1}^{n+1})_{\max}$, $[\varphi_{\min}]_{i+1}^{n+1} = (\varphi_{i+1}^{n+1})_{\min}$.

На рис. 2.5.6а приведено численное решение при $\alpha = 0,5$, $h = 1/30$. CFL = 0,45, NT = 60.

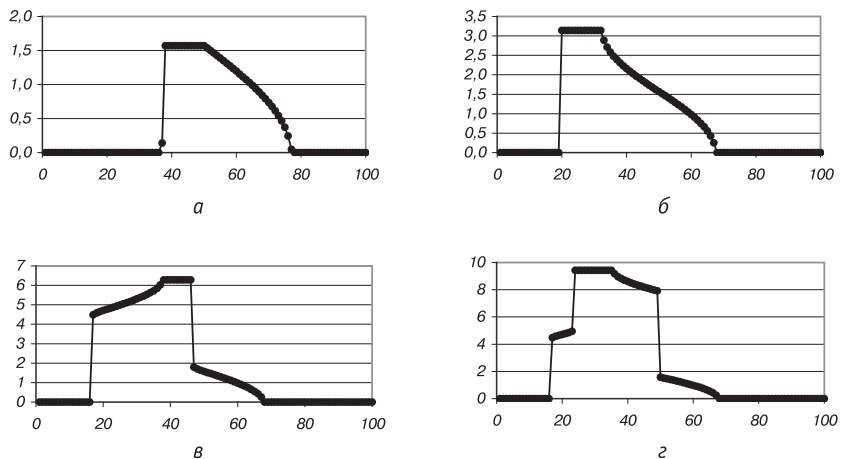


Рис. 2.5.6. Результаты расчета задачи Коши уравнения (2.5.3):

а — $\alpha = 0,5$, б — $\alpha = 1$, в — $\alpha = 2$, г — $\alpha = 3$

При $0,5 < \alpha \leq 1$ функция потоков остается выпуклой, а скорость звука меняет знак, что отвечает наличию так называемой звуковой точки. Поточные переменные, отвечающие минимальному потоку, определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} [F_{\min}]_{i+1}^{n+1} &= \min \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_L, (\varphi_{i+1}^{n+1})_R, (\varphi_{i+1}^{n+1})_C \right], \\ [F_{\max}]_{i+1}^{n+1} &= \max \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_L, (\varphi_{i+1}^{n+1})_R, (\varphi_{i+1}^{n+1})_C \right], \end{aligned} \quad (2.5.18)$$

$$\begin{aligned} \text{если } \left\{ [F_{\min}]_{i+1}^{n+1} = F \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_L \right] \right\}, & \text{ то } [\varphi_{\min}]_{i+1}^{n+1} = (\varphi_{i+1}^{n+1})_L, \\ \text{если } \left\{ [F_{\min}]_{i+1}^{n+1} = F \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_R \right] \right\}, & \text{ то } [\varphi_{\min}]_{i+1}^{n+1} = (\varphi_{i+1}^{n+1})_R, \\ \text{если } \left\{ [F_{\min}]_{i+1}^{n+1} = F \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_C \right] \right\}, & \text{ то } [\varphi_{\min}]_{i+1}^{n+1} = (\varphi_{i+1}^{n+1})_C, \end{aligned} \quad (2.5.19)$$

$$\begin{aligned} \text{если } \left\{ [F_{\max}]_{i+1}^{n+1} = F \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_L \right] \right\}, & \text{ то } [\varphi_{\max}]_{i+1}^{n+1} = (\varphi_{i+1}^{n+1})_L, \\ \text{если } \left\{ [F_{\max}]_{i+1}^{n+1} = F \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_R \right] \right\}, & \text{ то } [\varphi_{\max}]_{i+1}^{n+1} = (\varphi_{i+1}^{n+1})_R, \\ \text{если } \left\{ [F_{\max}]_{i+1}^{n+1} = F \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_C \right] \right\}, & \text{ то } [\varphi_{\max}]_{i+1}^{n+1} = (\varphi_{i+1}^{n+1})_C, \end{aligned} \quad (2.5.20)$$

На **рис. 2.5.6б** представлено решение при $\alpha = 1$, $h = 1/30$ и $\text{CFL} = 0,45$, $\text{NT} = 40$.

При $1 < \alpha \leq 2,5$ функция потоков перестает быть выпуклой, а скорость звука меняет знак два раза. При вычислении максимальных и минимальных потоков процедуры (2.5.19) и (2.5.20) в этом случае следует дополнить следующими условиями:

$$\begin{aligned} \text{если } \left\{ \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_{\max} > \pi/2 \right] \text{ и } \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_{\min} < \pi/2 \right] \right\}, & \text{ то } (\varphi_{\max})_{i+1}^{n+1} = \pi/2, \\ \text{если } \left\{ \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_{\max} > 3\pi/2 \right] \text{ и } \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_{\min} < 3\pi/2 \right] \right\}, & \text{ то } (\varphi_{\min})_{i+1}^{n+1} = 3\pi/2. \end{aligned} \quad (2.5.21)$$

На **рис. 2.5.6в** представлено решение при $\alpha = 2$, $h = 1/30$ и $\text{CFL} = 0,45$, $\text{NT} = 40$.

При $2,5 < \alpha \leq 3,5$ в связи с появлением нового локального максимума добавляется условие

$$\text{если } \left\{ \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_{\max} > 5\pi/2 \right] \text{ и } \left[(\varphi_{i+1}^{n+1})_{\min} < 5\pi/2 \right] \right\}, \text{ то } (\varphi_{\max})_{i+1}^{n+1} = 5\pi/2$$

и т. д.

На **рис. 2.5.6г** представлено решение при $\alpha = 3$, $h = 1/30$ и $\text{CFL} = 0,45$, $\text{NT} = 40$.

6. Немонотонная функция потоков с разрывной производной: $F(s) = |(x-1)^2 - 1|$. На рис. 2.5.7 приведены графики решения на различные моменты времени с начальными данными в виде ступеньки:

$$\varphi(x, 0) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \leq 0, \\ 3, & \text{если } 0 < x \leq 1, \\ 0, & \text{если } x > 1. \end{cases}$$

Численное решение хорошо передает как ударные волны, так и волны разрежения.

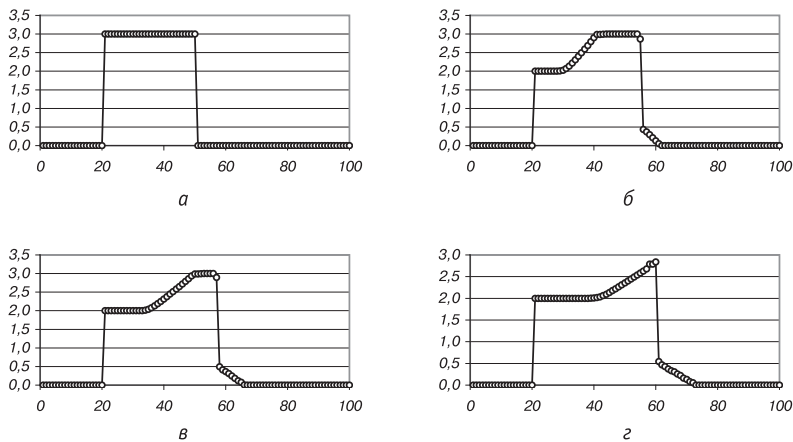


Рис. 2.5.7. Результаты расчета задачи с немонотонной разрывной функцией потоков: а — NT = 0, б — NT = 50, в — NT = 70, z — NT = 100

2.5.6. Скалярный закон сохранения с функцией потоков, зависящей от координат

Рассмотрим скалярный закон сохранения в виде

$$m(x) \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial [k(x) F(s)]}{\partial x} = 0. \quad (2.5.22)$$

Характеристическая форма этого уравнения будет иметь вид

$$\frac{\partial s}{\partial t} + \frac{k(x)}{m(x)} \frac{\partial}{\partial x} F(s) = Q = - \frac{F(s)}{m(x)} \frac{\partial k(x)}{\partial x}. \quad (2.5.23)$$

Балансно-характеристический алгоритм, описанный выше, для уравнений (2.5.22) и (2.5.23) несколько модифицируется. Если отнести величины абсолютных проницаемостей k_i к узлам расчетной сетки, а пористость $m_{i+1/2}$ — к серединам расчетных ячеек, то дивергентные уравнения (2.5.5) и (2.5.6) примут соответственно вид

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1} - S_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{1}{h} \left\{ \frac{k_{i+1} [F(s_{i+1}^{n+1}) + F(s_{i+1}^n)]}{2} - \frac{k_i [F(s_i^{n+1}) + F(s_i^n)]}{2} \right\} = 0, \quad (2.5.24)$$

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \frac{k_{i+1} F(s_{i+1}^n) - k_i F(s_i^n)}{h} = 0. \quad (2.5.25)$$

Принцип максимума в форме (2.5.8) и (2.5.9) заменится на:

$$\begin{aligned} s(x_i, t_{n+1}) &\leq \max_{x \in [x_{i-1}, x_i]}(s) + \tau \max_{(x,t) \in \Omega_{i-1/2}^{n+1/2}}(Q), \\ s(x_i, t_{n+1}) &\geq \min_{x \in [x_{i-1}, x_i]}(s) + \tau \min_{(x,t) \in \Omega_{i-1/2}^{n+1/2}}(Q), \quad \Omega_{i-1/2}^{n+1/2} = [x_{i-1}, x_i] \times [t_n, t_{n+1}] \end{aligned} \quad (2.5.26)$$

и

$$\begin{aligned} s(x_i, t_{n+1}) &\leq \max_{x \in [x_i, x_{i+1}]}(s) + \tau \max_{(x,t) \in \Omega_{i+1/2}^{n+1/2}}(Q), \\ s(x_i, t_{n+1}) &\geq \min_{x \in [x_i, x_{i+1}]}(s) + \tau \min_{(x,t) \in \Omega_{i+1/2}^{n+1/2}}(Q), \quad \Omega_{i+1/2}^{n+1/2} = [x_i, x_{i+1}] \times [t_n, t_{n+1}], \end{aligned} \quad (2.5.27)$$

так что для сеточных функций вместо (2.5.8) и (2.5.9) будем иметь

$$\begin{aligned} s_i^{n+1} &\leq \max(s_{i-1}^n, s_i^n) - \tau \frac{F(S_{i-1/2}^{n+1})}{m_{i-1/2}} \frac{k_i - k_{i-1}}{h}; \\ s_i^{n+1} &\geq \min(s_{i-1}^n, s_i^n) - \tau \frac{F(S_{i-1/2}^{n+1})}{m_{i-1/2}} \frac{k_i - k_{i-1}}{h}, \\ s_i^{n+1} &\leq \max(s_{i+1}^n, s_i^n) - \tau \frac{F(S_{i+1/2}^{n+1})}{m_{i+1/2}} \frac{k_{i+1} - k_i}{h}; \\ s_i^{n+1} &\geq \min(s_{i+1}^n, s_i^n) - \tau \frac{F(S_{i+1/2}^{n+1})}{m_{i+1/2}} \frac{k_{i+1} - k_i}{h}. \end{aligned} \quad (2.5.28)$$

Изменится и условие устойчивости. Вместо (2.5.16) ограничение на величину допустимого шага по времени запишется так:

$$\text{CFL} = \frac{\max |c_{i+1/2}^{n+1/2}| \tau}{h} \leq 1, \quad c_{i+1/2}^{n+1/2} = c_{i+1/2}^{n+1/2} \frac{k_{i+1} + k_i}{2 \cdot m_{i+1/2}}. \quad (2.5.29)$$

2.5.7. Примеры тестовых расчетов

1. Задача Хопфа на разрывном поле возрастающей проницаемости.

Параметры задачи: $F(s) = s^2/2$, $m_{i+1/2} \equiv 1$, $\text{CFL} = 0,45$.

$$k_i = \begin{cases} 1, & \text{если } i \leq 20, \\ 2, & \text{если } 20 < i \leq 50, \\ 6, & \text{если } i > 50, \end{cases} \quad S_{i+1/2}^0 = \begin{cases} 0,4, & \text{если } i \leq 20, \\ 0, & \text{если } 20 < i \leq 50, \\ 0, & \text{если } i > 50. \end{cases}$$

На **рис. 2.5.8а, 2.5.8б** приведены графики консервативных и потоковых переменных на момент времени, соответствующий номеру временного шага $\text{NT} = 200$. Видно, что ударные волны при переходе через линии разрыва проницаемости остаются монотонными.

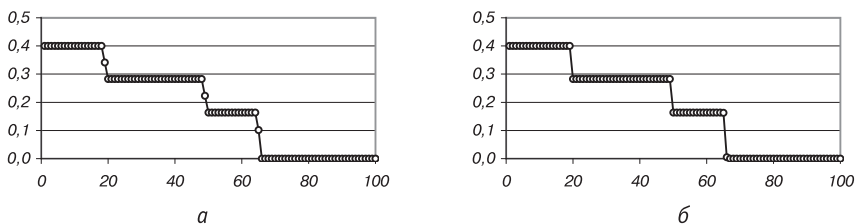


Рис. 2.5.8. Результаты расчета задачи Хопфа на разрывном поле возрастающей проницаемости ($\text{NT} = 200$):

а — консервативные переменные, *б* — потоковые переменные

2. Задача Хопфа на разрывном поле возрастающей проницаемости при ненулевой фоновой концентрации.

$$k_i = \begin{cases} 1, & \text{если } i \leq 20, \\ 2, & \text{если } 20 < i \leq 50, \\ 11, & \text{если } i > 50, \end{cases} \quad S_{i+1/2}^0 = \begin{cases} 0,4, & \text{если } i \leq 20, \\ 0,15, & \text{если } 20 < i \leq 50, \\ 0,15, & \text{если } i > 50. \end{cases}$$

В этом случае концентрация s на границе перепада значений коэффициента k может принимать отрицательные значения. Если считать их допустимыми, то решение на двухсотом шаге по времени представлено на **рис. 2.5.9а**.

В некоторых задачах отрицательного значения концентрации допускать не следует ни в какой момент времени. Для этого достаточно на каждом временном шаге проводить коррекцию получаемого решения следующим образом:

$$\text{если } (S_{i+1/2}^{n+1} < 0), \text{ то } \{S_{i+3/2}^{n+1} = S_{i+3/2}^{n+1} + S_{i+1/2}^{n+1}; S_{i+1/2}^{n+1} = 0\}.$$

Такая процедура эквивалентна специальной форме нелинейной коррекции потоков, предохраняющей от возникновения отрицательных значений влагонасыщенности. Результат расчетов задачи с консервативной коррекцией приведен на **рис. 2.5.9б**.

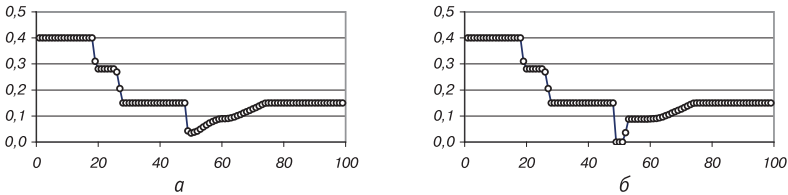


Рис. 2.5.9. Результаты расчета задачи Хопфа на разрывном поле возрастающей проницаемости при ненулевой фоновой концентрации ($NT = 200$):
 a — без коррекции потоков, b — с коррекцией потоков

3. Задача Хопфа на монотонно убывающей функции абсолютных проницаемостей.

$$k_i = \begin{cases} 1, & \text{если } i \leq 20, \\ 1/2, & \text{если } 20 < i \leq 50, \\ 1/11, & \text{если } i > 50, \end{cases} \quad S_{i+1/2}^0 = \begin{cases} 0,4, & \text{если } i \leq 20, \\ 0, & \text{если } 20 < i \leq 50, \\ 0, & \text{если } i > 50. \end{cases}$$

На **рис. 2.5.10** приведены графики решения на время $NT = 200$ и $NT = 500$ при $CFL = 0,4$. Видно, что при малых проницаемостях решение превышает единицу.

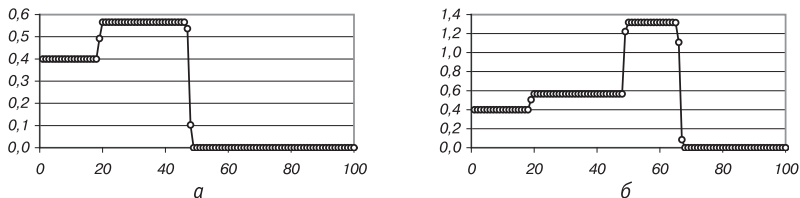


Рис. 2.5.10. Результаты расчета задачи Хопфа на монотонно убывающей функции абсолютных проницаемостей: a — $NT = 200$, b — $NT = 500$

2.5.8. Задача об одномерном просачивании жидкости в пустую (ничем не заполненную) пористую среду с учетом ограничивающих связей

В предыдущем примере решение $s(x, t)$ в области малых коэффициентов проницаемости оказывается больше единицы. Если трактовать функцию $s(x, t)$ как влагонасыщенность, которая не может превышать единицу, то решение становится физически абсурдным. Чтобы этого избежать, следует учесть влияние давления, которое можно трактовать как реакцию системы, препятствующую возникновению ситуации, когда $s > 1$.

Если отбросить малосущественные детали, будем предполагать, что плотность воздуха и коэффициент его динамической вязкости равны нулю, что физически отвечает условиям вакуума. Уравнение баланса влагонасыщенности в этом случае принимает вид

$$m(x) \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma(x) \left(g \rho_w - \frac{\partial p}{\partial x} \right) F(s) \right] = 0, \quad (2.5.30)$$

$$\sigma(x) = \frac{\tilde{k}_x(x)}{\mu_w \rho_w},$$

где \tilde{k}_x — абсолютная проницаемость в направлении x ; μ_w — коэффициент динамической вязкости воды; ρ_w — плотность воды.

Потребуем, чтобы решение этого уравнения не превышало единицы, т. е. наложим на него удерживающую связь:

$$0 \leq s(x, t) \leq 1. \quad (2.5.31)$$

Для численного решения системы (2.5.30) и (2.5.31) в дополнение к уже ранее использованному введем сеточную функцию давления $p_{i+1/2}^n$, которую будем относить к серединам горизонтальных граней расчетных ячеек. Уравнение баланса (2.5.30) с учетом сил давления аппроксимируем следующим образом:

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1} - S_{i+1/2}^n}{\tau} + \frac{1}{2h} \left[\sigma_{i+1} \left(g \rho - \frac{p_{i+3/2}^{n+1} - p_{i+1/2}^{n+1}}{h} \right) F(s_{i+1}^{n+1}) \right] -$$

$$- \frac{1}{2h} \left[\sigma_i \left(g \rho - \frac{p_{i+1/2}^{n+1} - p_{i-1/2}^{n+1}}{h} \right) F(s_i^{n+1}) \right] +$$

$$\begin{aligned}
 & + \frac{1}{2h} \left[\sigma_{i+1} \left(g\rho - \frac{P_{i+3/2}^n - P_{i+1/2}^n}{h} \right) F(s_{i+1}^n) \right] - \\
 & - \frac{1}{2h} \left[\sigma_i \left(g\rho - \frac{P_{i+1/2}^n - P_{i-1/2}^n}{h} \right) F(s_i^n) \right] = 0.
 \end{aligned} \tag{2.5.32}$$

Будем считать значения всех сеточных функций на текущем временном слое известными.

Как и в более простых случаях, рассмотренных выше, вычислим сначала промежуточные значения консервативных переменных по явной консервативной схеме первого порядка:

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \frac{1}{h} \left[d_{i+1}^n F(s_{i+1}^n) - d_i^n F(s_i^n) \right] = 0, \tag{2.5.33}$$

где

$$d_i^n = \sigma_i \left(g\rho - \frac{P_{i+1/2}^n - P_{i-1/2}^n}{h} \right). \tag{2.5.34}$$

Далее по формулам линейной экстраполяции вычислим левые и правые прикидочные значения потоковых переменных на новом временном слое

$$(\tilde{s}_L)_i^{n+1} = 2S_{i-1/2}^{n+1/2} - s_{i-1}^n, \quad (\tilde{s}_R)_i^{n+1} = 2S_{i+1/2}^{n+1/2} - s_{i+1}^n, \tag{2.5.35}$$

и подвергнем их коррекции в соответствии с принципом максимума:

$$(s_L)_i^{n+1} = \begin{cases} (\tilde{s}_L)_i^{n+1}, & \text{если } \min(s_r)_{i-1/2} \leq (\tilde{s}_L)_i^{n+1} \leq \max(s_r)_{i-1/2}, \\ \min(s_r)_{i-1/2}, & \text{если } (\tilde{s}_L)_i^{n+1} < \min(s_r)_{i-1/2}, \\ \max(s_r)_{i-1/2}, & \text{если } (\tilde{s}_L)_i^{n+1} > \max(s_r)_{i-1/2}, \end{cases} \tag{2.5.36}$$

$$(s_R)_i^{n+1} = \begin{cases} (\tilde{s}_R)_i^{n+1}, & \text{если } (s_l)_{i+1/2} \leq (\tilde{s}_R)_i^{n+1} \leq \max(s_l)_{i+1/2}, \\ \min(s_l)_{i+1/2}, & \text{если } (\tilde{s}_R)_i^{n+1} < \min(s_l)_{i+1/2}, \\ \max(s_l)_{i+1/2}, & \text{если } (\tilde{s}_R)_i^{n+1} > \max(s_l)_{i+1/2}, \end{cases} \tag{2.5.37}$$

где

$$\begin{aligned}
 \min(s_r)_{i-1/2} &= \min\{0, s_{i-1}^n, s_i^n\} + \tau(Q_r)_{i-1/2}, \\
 \max(s_r)_{i-1/2} &= \max\{1, s_{i-1}^n, s_i^n\} + \tau(Q_r)_{i-1/2}, \\
 \min(s_l)_{i+1/2} &= \min\{0, s_{i+1}^n, s_i^n\} + \tau(Q_l)_{i+1/2}, \\
 \max(s_l)_{i+1/2} &= \max\{1, s_{i+1}^n, s_i^n\} + \tau(Q_l)_{i+1/2},
 \end{aligned}
 \tag{2.5.38}$$

$$\begin{aligned}
 (Q_r)_{i-1/2} &= \begin{cases} -F(S_{i-1/2}^{n+1/2}) \frac{d_i^n - d_{i-1}^n}{m_{i-1/2} h}, & \text{если } F'(S_{i-1/2}^{n+1/2}) \geq 0, \\ 0, & \text{если } F'(S_{i-1/2}^{n+1/2}) < 0, \end{cases} \\
 (Q_l)_{i+1/2} &= \begin{cases} -F(S_{i+1/2}^{n+1/2}) \frac{d_{i+1}^n - d_i^n}{m_{i+1/2} h}, & \text{если } F'(S_{i+1/2}^{n+1/2}) < 0, \\ 0, & \text{если } F'(S_{i+1/2}^{n+1/2}) \geq 0. \end{cases}
 \end{aligned}
 \tag{2.5.39}$$

Новые потоковые переменные находятся из принципа наибоыстрейшего уменьшения локальной вариации консервативных переменных. Для этого вычислим максимальные и минимальные значения потока $F(s)$ на отрезке $[(s_R)_i^{n+1}, (s_L)_i^{n+1}]$:

$$\max F = \max_{s \in [(s_R)_i^{n+1}, (s_L)_i^{n+1}]} [F(s)], \quad \min F = \min_{s \in [(s_R)_i^{n+1}, (s_L)_i^{n+1}]} [F(s)].$$

Обозначим через s_{\max} , s_{\min} те значения, при которых достигаются максимум и минимум этих потоков. Окончательные величины s_i^{n+1} найдем из условия

$$s_i^{n+1} = \begin{cases} s_{\max}, & \text{если } S_{i-1/2}^{n+1/2} \geq S_{i+1/2}^{n+1/2}, \\ s_{\min}, & \text{если } S_{i-1/2}^{n+1/2} < S_{i+1/2}^{n+1/2}. \end{cases}$$

После вычисления новых потоковых переменных новые значения консервативных переменных $S_{i+1/2}^{n+1}$ и давления $p_{i+1/2}^{n+1}$ определяются из уравнений (2.5.32) и ограничений

$$0 \leq S_{i+1/2}^{n+1} \leq 1. \tag{2.5.40}$$

Действительно, из (2.5.32) и (2.5.33) следует, что

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1} - S_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{J_{i+1}^{n+1} - J_i^n}{h} = 0, \quad (2.5.41)$$

$$J_i^{n+1} = \sigma_i F(s_i^{n+1}) \left[g\rho - \left(\frac{P_{i+1/2}^{n+1} - P_{i-1/2}^{n+1}}{h} \right) \right].$$

Для решения уравнения (2.5.41) рассмотрим следующий итерационный процесс:

$$m_{i+1/2} \frac{[S_{i+1/2}^{n+1}]^j - S_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{[J_{i+1}^{n+1}]^j - [J_i^{n+1}]^j}{h} = 0, \quad (2.5.42)$$

$$[J_i^{n+1}]^j = \sigma_i F(s_i^{n+1}) \left[g\rho - \left(\frac{P_{i+1/2}^n - P_{i-1/2}^n}{h} \right) + J_i^j \right],$$

где j — номер итерации. Будем считать, что

$$[J_i^{n+1}]^0 = 0, [J_i^{n+1}]^{j+1} = [J_i^{n+1}]^j + [\delta J_i^{n+1}]^{j+1}, [P_{i+1/2}^{n+1}]^0 = P_{i+1/2}^n,$$

$$[P_{i+1/2}^{n+1}]^{j+1} = [P_{i+1/2}^{n+1}]^j + [\delta P_{i+1/2}^{n+1}]^{j+1}, [\delta J_i^{n+1}]^{j+1} = \sigma_i F(s_i^{n+1}) \delta J_i^{j+1}, \quad (2.5.43)$$

$$\delta J_i^{j+1} = - \frac{[\delta P_{i+1/2}^{n+1}]^j - [\delta P_{i-1/2}^{n+1}]^j}{h}.$$

После каждой итерации, в том числе и после нулевой, будем вычислять величины уклонений влагонасыщенности от допустимых пределов $(\Delta S)_{i+1/2}^{j+1}$:

$$(\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} = \frac{[1 - \text{sign}(1 - [S_{i+1/2}^{n+1}]^j)]}{2} (1 - [S_{i+1/2}^{n+1}]^j) - \frac{[1 - \text{sign}([S_{i+1/2}^{n+1}]^j)]}{2} [S_{i+1/2}^{n+1}]^j. \quad (2.5.44)$$

Величины $(\Delta S)_{i+1/2}^{j+1}$ отличны от нуля только в тех расчетных ячейках, где новые консервативные переменные $[S_{i+1/2}^{n+1}]^j$, вычисленные по формуле (2.5.42), не удовлетворяют требованию (2.5.40): $0 \leq [S_{i+1/2}^{n+1}]^j \leq 1$. Если все они равны нулю, то итерационный процесс заканчивается, если нет,

то новые вариации потоков $(\delta J)_i^{j+1}$ вычисляются из условия их наименьшего отклонения от нуля, т. е. из условия минимального значения функционала

$$\Phi = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{i=N-1} \left\{ \eta_i \left(\left[\delta J_i^{n+1} \right]^{j+1} \right)^2 + \eta_{i+1} \left(\left[\delta J_{i+1}^{n+1} \right]^{j+1} \right)^2 \right\} h, \quad (2.5.45)$$

где η_i — неотрицательные весовые множители, которые будем выбирать как $\eta_i = 1 / \left[\sigma_i F \left(s_i^{n+1} \right) \right]$ при ограничениях

$$\frac{m_{i+1/2}}{\tau/2} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} + \frac{\left[\delta J_{i+1}^{n+1} \right]^{j+1} - \left[\delta J_i^{n+1} \right]^{j+1}}{h} = 0, \quad (2.5.46)$$

обеспечивающих возвращение влагонасыщенности в заданные пределы.

Условие (2.5.46) содержит вариации потоков только на границах расчетных ячеек, в которых нарушаются ограничивающие связи, в остальных узлах эти вариации естественно полагать равными нулю. Это приводит нас к формулировке следующего вариационного принципа: вариации потоков должны наименьшим образом уклоняться от нуля при соблюдении вариационных связей (2.5.46).

Учтем эти связи методом множителей Лагранжа, т. е. будем искать экстремум модифицированного функционала:

$$\begin{aligned} \Phi = & \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{i=N-1} \left\{ \eta_i \left(\left[\delta J_i^{n+1} \right]^{j+1} \right)^2 + \eta_{i+1} \left(\left[\delta J_{i+1}^{n+1} \right]^{j+1} \right)^2 \right\} h + \\ & + \sum_{i=1}^{i=N-1} \left\{ \lambda_{i+1/2}^{j+1} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} \left(\frac{m_{i+1/2}}{\tau/2} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} + \frac{\left[\delta J_{i+1}^{n+1} \right]^{j+1} - \left[\delta J_i^{n+1} \right]^{j+1}}{h} \right) \right\} h, \end{aligned} \quad (2.5.47)$$

где величины $\lambda_{i+1/2}$ представляют собой множители Лагранжа, а множитель $(\Delta S)_{i+1/2}^{j+1}$ выделяет во второй сумме только те слагаемые, которые отвечают ненулевым отклонениям от заданных пределов. Необходимые условия равенства нулю первой вариации этого функционала приводят к уравнениям

$$\eta_i \left[\delta J_i^{n+1} \right]^{j+1} + \frac{\lambda_{i+1/2}^{j+1} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} - \lambda_{i-1/2}^{j+1} (\Delta S)_{i-1/2}^{j+1}}{h} = 0. \quad (2.5.48)$$

Сравнивая полученное равенство с последним соотношением из (2.5.43), приходим к выводу, что вариации давления и множители Лагранжа связаны условием

$$\lambda_{i+1/2} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} = [\delta p_{i+1/2}^{n+1}]^{j+1}. \quad (2.5.49)$$

Подставляя (2.5.48) в (2.5.46), найдем:

$$\begin{aligned} & \frac{m_{i+1/2}}{\tau/2} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} = \\ & = \sigma_{i+1} F(s_{i+1}^{n+1}) \left[\frac{\lambda_{i+3/2} (\Delta S)_{i+3/2}^{j+1} - \lambda_{i+1/2} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1}}{h^2} \right] - \\ & - \sigma_i F(s_i^{n+1}) \left[\frac{\lambda_{i+1/2} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} - \lambda_{i-1/2} (\Delta S)_{i-1/2}^{j+1}}{h^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.5.50)$$

По структуре эта система представляет собой разностное эллиптическое уравнение с трехдиагональной матрицей относительно переменных $\lambda_{i+1/2} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1}$, поэтому, чтобы найти ее численное решение, на левом и правом концах расчетной области необходимо задать граничные условия. Будем считать, что на обеих границах заданы условия первого рода:

$$\lambda_{1/2} = 0, \quad \lambda_{N+1/2} = 0. \quad (2.5.51)$$

Необходимо отметить, что рассматриваемая система может быть сильно вырожденной — во многих ячейках величины $(\Delta S)_{i+1/2}^{j+1}$ могут оказаться равными нулю, кроме того, могут быть равны нулю и некоторые из величин $\sigma_i F(s_i^{n+1})$. Опишем модификацию метода прогонки, позволяющую обойти указанные трудности. Представим (2.5.50) в виде

$$A_{i+1/2} \lambda_{i-1/2} - C_{i+1/2} \lambda_{i+1/2} + B_{i+1/2} \lambda_{i+3/2} = F_{i+1/2}, \quad (2.5.52)$$

где

$$\begin{aligned} A_{i+1/2} &= \frac{1}{h^2} \sigma_i F(s_i^{n+1}) (\Delta S)_{i-1/2}^{j+1}, \\ B_{i+1/2} &= \frac{1}{h^2} \sigma_{i+1} F(s_{i+1}^{n+1}) (\Delta S)_{i+3/2}^{j+1}, \quad F_{i+1/2} = \frac{m_{i+1/2}}{\tau/2} (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1}, \end{aligned}$$

$$C_{i+1/2} = \frac{1}{h^2} \sigma_i F(s_i^{n+1}) (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1} + \frac{1}{h^2} \sigma_{i+1} F(s_{i+1}^{n+1}) (\Delta S)_{i+1/2}^{j+1}.$$

Полагая

$$\lambda_{i+1/2} = \alpha_{i+1/2} \lambda_{i-1/2} + \beta_{i+1/2}$$

и подставляя это соотношение в (2.5.52), найдем

$$\begin{aligned} \alpha_{i+1/2} &= \frac{A_{i+1/2}}{(C_{i+1/2} - B_{i+1/2} \alpha_{i+3/2})}, \\ \beta_{i+1/2} &= \frac{(B_{i+1/2} \beta_{i+3/2} - F_{i+1/2})}{(C_{i+1/2} - B_{i+1/2} \alpha_{i+3/2})}. \end{aligned} \quad (2.5.53)$$

Вследствие граничного условия (2.5.51) на правой границе

$$\alpha_{N+1/2} = 0, \beta_{N+1/2} = 0.$$

При вычислении прогоночных коэффициентов в соответствии с (2.5.53) будем считать, что если знаменатель равен нулю, то и вычисляемые коэффициенты также равны нулю, т. е.

$$\begin{aligned} \text{если } |(C_{i+1/2} - B_{i+1/2} \alpha_{i+3/2})| \leq \varepsilon, \\ \text{то } \{\alpha_{i+1/2} = 0, \beta_{i+1/2} = 0\}, \end{aligned} \quad (2.5.54)$$

где ε — достаточно малое положительное число. По известным коэффициентам α , β и граничному условию $\lambda_{1/2} = 0$ вычислим все остальные множители Лагранжа и из соотношений (2.5.49) найдем искомую вариацию давления.

На **рис. 2.5.11а** и **2.5.11б** приведены графики консервативных и потоковых переменных решения задачи, рассмотренной в предыдущем примере, с учетом удерживающих связей по описанному выше алгоритму. Видно, что нефизические значения влагосодержания не возникают, ударные волны остаются монотонными и размазываются на одну расчетную ячейку. На **рис. 2.5.11в** изображен профиль сил давления, удерживающих влагосодержание в заданных пределах.

На **рис. 2.5.11г** приведено решение аналогичной задачи с более резким перепадом проницаемостей, а именно:

$$k_i = \begin{cases} 1, & \text{если } i \leq 20, \\ 1/2, & \text{если } 20 < i \leq 50, \\ 10^{-5}, & \text{если } i > 50, \end{cases} \quad S_{i+1/2}^0 = \begin{cases} 0,4, & \text{если } i \leq 20, \\ 0, & \text{если } 20 < i \leq 50, \\ 0, & \text{если } i > 50. \end{cases}$$

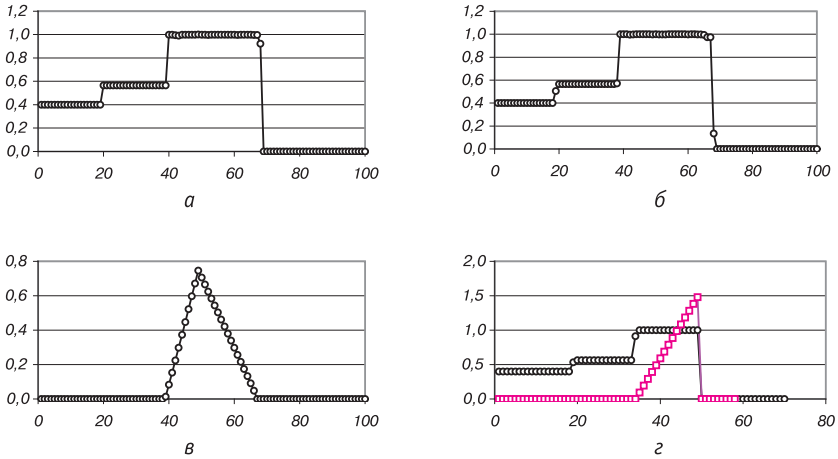


Рис. 2.5.11. Одномерное просачивание жидкости в пустую среду:
a — консервативная переменная, *б* — потоковая переменная,
в — профиль сил давления ($NT = 500, T = 0,49901$), *г* — более резкий перепад
 давления, потоковая переменная и поле сил давления
 ($NT = 600, T = 0,3, CFL = 0,2, k_3 = 10^{-5}$)

При таком перепаде проницаемости просачивания в плохо проводящую зону практически не происходит, и сила давления, обеспечивающая соблюдение ограничения $s \leq 1$, совпадает с давлением в гидростатическом столбе. Последнее обстоятельство оказывается чрезвычайно существенным при построении высокоэффективных вычислительных алгоритмов в многомерном случае.

2.5.9. Задача о просачивании жидкости в пустую (заполненную вакуумом) пористую среду с учетом капиллярных сил

Ограничимся далее рассмотрением относительно простого случая, когда влагонасыщенность s остается в естественных пределах $0 \leq s \leq 1$ без регуляризирующего воздействия давления p и учтем наличие сил поверхностного натяжения. Это приводит к нелинейному уравнению конвекции-диффузии

$$m(x) \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [g \sigma_x(x, t) F(s)] = \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma_x(x) \gamma(s) \frac{\partial s}{\partial x} \right]. \quad (2.5.55)$$

Опишем особенности балансно-характеристического алгоритма в этом случае.

Однопараметрическое семейство схем второго порядка аппроксимации для предиктора и заключительной части корректора записывается как

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i+1/2}^n}{\tau/2} + g \frac{\sigma_x(x_{i+1}) F(s_{i+1}^n) - \sigma_x(x_i) F(s_i^n)}{h} = \quad (2.5.56)$$

$$= L \left[\omega S^{n+1/2} + (1-\omega) S^n \right],$$

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1} - S_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{\sigma_x(x_{i+1}) F(s_{i+1}^{n+1}) - \sigma_x(x_i) F(s_i^{n+1})}{h} = \quad (2.5.57)$$

$$= L \left[(2-\omega) S^{n+1/2} - (1-\omega) S^n \right],$$

где оператор L определяется выражением

$$LS^* = \frac{1}{h} \left\{ \left[\sigma_{i+1} \gamma(s_{i+1}^n) \frac{S_{i+3/2}^* - S_{i+1/2}^*}{h} \right] - \left[\sigma_i \gamma(s_i^n) \frac{S_{i+1/2}^* - S_{i-1/2}^*}{h} \right] \right\}, \quad (2.5.58)$$

а параметр $\omega \in [0, 1]$.

При вычислении коэффициентов оператора L используются значения потоковых переменных только с текущего временного слоя, поэтому общий порядок аппроксимации исходного уравнения (2.5.55) оказывается первым. Не составляет большого труда модифицировать приведенные формулы таким образом, чтобы увеличить порядок аппроксимации до второго, однако мы этого делать не будем, чтобы не усложнять изложение малозначительными деталями.

Уравнение (2.5.56) естественным образом расщепляется на два:

$$m_{i+1/2} \frac{\tilde{S}_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i+1/2}^n}{\tau/2} + g \frac{\sigma_x(x_{i+1}) F(s_{i+1}^n) - \sigma_x(x_i) F(s_i^n)}{h} = \quad (2.5.59)$$

$$= (1-\omega) LS^n,$$

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - \tilde{S}_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} = \omega LS^{n+1/2}. \quad (2.5.60)$$

Первое из этих уравнений является явным и легко разрешается. Для решения второго при $\omega \neq 0$ следует использовать специальную форму алгоритма прогонки.

При коррекции прикидочных значений потоковых переменных, вычисленных как

$$\left(\tilde{s}_{i+1}^{n+1}\right)_L = 2S_{i+1/2}^{n+1/2} - s_i^n, \quad \left(\tilde{s}_{i+1}^{n+1}\right)_R = 2S_{i+3/2}^{n+1/2} - s_{i+2}^n, \quad (2.5.61)$$

допустимые пределы вариации новых значений потоковых величин будут определяться выражениями

$$\begin{aligned} s_i^{n+1} &\leq \max(s_{i-1}^n, s_i^n) + \tau Q_{i-1/2}^*, \quad s_i^{n+1} \geq \min(s_{i-1}^n, s_i^n) + \tau Q_{i-1/2}^*, \\ s_i^{n+1} &\leq \max(s_{i+1}^n, s_i^n) + \tau Q_{i+1/2}^*, \quad s_i^{n+1} \geq \min(s_{i+1}^n, s_i^n) + \tau Q_{i+1/2}^*, \end{aligned} \quad (2.5.62)$$

где

$$\begin{aligned} Q_{i-1/2}^* &= -gF(S_{i-1/2}^{n+1}) \frac{\sigma_i - \sigma_{i-1}}{hm_{i-1/2}} + \frac{L_{i-1/2} S^n}{m_{i-1/2}}, \\ Q_{i+1/2}^* &= -gF(S_{i+1/2}^{n+1}) \frac{\sigma_{i+1} - \sigma_i}{hm_{i+1/2}} + \frac{L_{i+1/2} S^n}{m_{i+1/2}}. \end{aligned}$$

Линейный анализ устойчивости алгоритма (2.5.56)—(2.5.62) показывает, что допустимый шаг по времени должен определяться из условия

$$\begin{aligned} \tau &\leq \text{CFL} \min(\tau_g, \tau_p), \quad \tau_g = \frac{1}{g \max_i \left[\sigma_i F'(s_i^n) / m_{i+1/2} \right]}, \\ \tau_p &= \frac{1}{2 \max_i \left[\sigma_i \gamma(s_i^n) / m_{i+1/2} \right]} \end{aligned} \quad (2.5.63)$$

для явной схемы и

$$\tau \leq \text{CFL} \tau_g \quad (2.5.64)$$

для неявной.

Как было отмечено ранее, функция $\gamma(s)$ при приближении s к единице неограниченно возрастает. Условие (2.5.63) в этом случае слишком обременительно, и в расчетах необходимо использовать неявную схему с параметром $\omega=1$. Кроме того, коэффициенты оператора (2.5.58) при $s=1$ становятся бесконечно большими, а в областях отсутствия

извлекаемой влаги могут становиться равными нулю. Такой разброс значений не позволяет использовать стандартную процедуру прогонки. Кратко опишем ее работоспособную модификацию.

Представим уравнение (2.5.60) в так называемой потоковой форме:

$$m_{i+1/2} \frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - \tilde{S}_{i+1/2}^{n+1/2}}{\tau/2} = - \frac{W_{i+1}^{n+1/2} - W_i^{n+1/2}}{h}, \quad (2.5.65)$$

$$W_i^{n+1/2} = -\sigma_i \gamma(s_i^n) \frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i-1/2}^{n+1/2}}{h}.$$

Второе уравнение этой системы запишем как

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{W_i^{n+1/2}}{\sqrt{\sigma_i \gamma(s_i^n)}} = -\sqrt{\sigma_i \gamma(s_i^n)} \frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i-1/2}^{n+1/2}}{h}, \text{ если } \varepsilon \leq \sigma_i \gamma(s_i^n) \leq \frac{1}{\varepsilon}, \\ \frac{W_i^{n+1/2}}{\sigma_i \gamma(s_i^n)} = -\frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i-1/2}^{n+1/2}}{h}, \text{ если } \sigma_i \gamma(s_i^n) > \frac{1}{\varepsilon}, \\ W_i^{n+1/2} = -\sigma_i \gamma(s_i^n) \frac{S_{i+1/2}^{n+1/2} - S_{i-1/2}^{n+1/2}}{h}, \text{ если } \sigma_i \gamma(s_i^n) < \varepsilon. \end{array} \right. \quad (2.5.66)$$

Выражая из первого уравнения системы (2.5.65) величины $S_{i+1/2}^{n+1/2}$

$$S_{i+1/2}^{n+1/2} = -\frac{\tau}{2} \frac{W_{i+1}^{n+1/2} - W_i^{n+1/2}}{hm_{i+1/2}} + \tilde{S}_{i+1/2}^{n+1/2} \quad (2.5.67)$$

и подставляя их в (2.5.66), получаем невырожденную систему трехточечных уравнений относительно потоков $W^{n+1/2}$, которую затем решаем обычной прогонкой. По вычисленным потокам из (2.5.67) однозначно находятся новые значения консервативных переменных на промежуточном временном слое.

2.5.10. Одномерная модель протекания жидкости в двухпористой среде с двойной проницаемостью

В одномерном приближении модель двойной пористости — двойной проницаемости принимает вид

$$\begin{aligned}
& m^{(1)}(x) \frac{\partial s^{(1)}}{\partial t} + g\rho \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma_x^{(1)}(x) F^{(1)}(s^{(1)}) \right] = \\
& = \chi(m^{(1)}, m^{(2)}) \left[P_c^{(2)}(s^{(2)}) - P_c^{(1)}(s^{(1)}) \right], \\
& m^{(2)}(x) \frac{\partial s^{(2)}}{\partial t} + g\rho \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma_x^{(2)}(x) F^{(2)}(s^{(2)}) \right] = \\
& = \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma_x^{(2)}(x) \gamma(s^{(2)}) \frac{\partial s^{(2)}}{\partial x} \right] - \\
& - \chi(m^{(1)}, m^{(2)}) \left[P_c^{(2)}(s^{(2)}) - P_c^{(1)}(s^{(1)}) \right].
\end{aligned} \tag{2.5.68}$$

При решении уравнений (2.5.68) необходимо учитывать удерживающие связи (2.4.13). При численном решении системы (2.5.68) появится только одна вычислительная особенность, связанная с учетом обменных членов.

На этапе вычисления промежуточных значений консервативных переменных соответствующие разностные схемы естественно расщепить следующим образом:

$$\begin{aligned}
& m_{i+1/2}^{(1)} \frac{\left[\tilde{S}^{(1)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} - \left[S^{(1)} \right]_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \\
& + g \frac{\sigma_x^{(1)}(x_{i+1}) F^{(1)}\left(\left[s^{(1)} \right]_{i+1}^n\right) - \sigma_x^{(1)}(x_i) F^{(1)}\left(\left[s^{(1)} \right]_i^n\right)}{h} = 0,
\end{aligned} \tag{2.5.69}$$

$$\begin{aligned}
& m_{i+1/2}^{(1)} \frac{\left[\tilde{S}^{(2)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} - \left[S^{(2)} \right]_{i+1/2}^n}{\tau/2} + \\
& + g \frac{\sigma_x^{(2)}(x_{i+1}) F^{(2)}\left(\left[s^{(2)} \right]_{i+1}^n\right) - \sigma_x^{(2)}(x_i) F^{(2)}\left(\left[s^{(2)} \right]_i^n\right)}{h} = \\
& = -(1-\omega) LS^n,
\end{aligned} \tag{2.5.70}$$

$$\begin{aligned}
 & m_{i+1/2}^{(1)} \frac{\left[\tilde{S}^{(1)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} - \left[\tilde{S}^{(1)} \right]_{i+1/2}^n}{\tau/2} = \\
 & = \chi \left(m^{(1)}, m^{(2)} \right) \left[P_c^{(2)} \left(\left[\tilde{S}^{(2)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} \right) - P_c^{(1)} \left(\left[\tilde{S}^{(1)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} \right) \right], \\
 & m_{i+1/2}^{(2)} \frac{\left[\tilde{S}^{(2)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} - \left[\tilde{S}^{(2)} \right]_{i+1/2}^n}{\tau/2} = \\
 & = -\chi \left(m^{(1)}, m^{(2)} \right) \left[P_c^{(2)} \left(\left[\tilde{S}^{(2)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} \right) - P_c^{(2)} \left(\left[\tilde{S}^{(1)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} \right) \right],
 \end{aligned} \tag{2.5.71}$$

$$\begin{aligned}
 & m_{i+1/2}^{(1)} \frac{\left[S^{(1)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} - \left[\tilde{S}^{(1)} \right]_{i+1/2}^n}{\tau/2} = 0, \\
 & m_{i+1/2}^{(2)} \frac{\left[S^{(2)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2} - \left[\tilde{S}^{(2)} \right]_{i+1/2}^n}{\tau/2} = (1 - \omega) L \left[S^{(2)} \right]_{i+1/2}^{n+1/2}.
 \end{aligned} \tag{2.5.72}$$

Система уравнений (2.5.71) решается методом Ньютона. На других этапах вычислений следует учесть влияние обменных членов на пределы допустимого изменения потоковых переменных, определяемых принципом максимума.

Ограничения типа (2.5.63) на выбор максимально допустимого шага по времени должны выполняться для каждого из континуумов.

2.6. Двумерная модель протекания жидкости в пористую пустую среду

2.6.1. Двумерная постановка задачи

Рассмотрим задачу в двумерной постановке. Будем предполагать, что ускорение свободного падения направлено по оси x . Уравнение, описывающее динамику влаги, примет вид

$$\begin{aligned}
 m(x, y) \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [k_x(x, y, t) F(s)] + \frac{\partial}{\partial y} [k_y(x, y, t) F(s)] = \\
 = \frac{\partial}{\partial x} \left[\sigma_x(x, y) \gamma(s) \frac{\partial s}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[\sigma_y(x, y) \gamma(s) \frac{\partial s}{\partial y} \right],
 \end{aligned} \tag{2.6.1}$$

где

$$\begin{aligned}
 k_x(x, y, t) = \sigma_x(x, y) \left[g \rho_w - \frac{\partial p}{\partial x} \right], \quad k_y(x, y, t) = -\sigma_y(x, y) \frac{\partial p}{\partial y}, \\
 \sigma_x(x, y) = \frac{\tilde{k}_x(x, y)}{\mu_w \rho_w}, \quad \sigma_y(x, y) = \frac{\tilde{k}_y(x, y)}{\mu_w \rho_w}.
 \end{aligned}$$

Решение уравнения (2.6.1) должно удовлетворять следующим ограничениям:

$$0 \leq s(x, y, t) \leq 1. \tag{2.6.2}$$

При просачивании влаги по сети относительно крупных трещин влиянием поверхностного натяжения можно пренебречь, и уравнение (2.6.1) примет вид

$$\begin{aligned}
 m(x, y) \frac{\partial s}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} [k_x(x, y, t) F(s)] + \\
 + \frac{\partial}{\partial y} [k_y(x, y, t) F(s)] = 0.
 \end{aligned} \tag{2.6.3}$$

2.6.2. Дискретная модель

В двумерной области G введем равномерную расчетную сетку с шагами h_x, h_y по соответствующим пространственным переменным. Как и в одномерном случае, будем считать, что сила тяжести направлена по оси x . Коэффициенты пористости среды $m(x, y)$ будем относить к центрам расчетных ячеек и обозначать как $m_{i+1/2, j+1/2}$. Консервативные значения функции влажности и давления также будем относить к центрам ячеек и обозначать как $S_{i+1/2, j+1/2}^n, P_{i+1/2, j+1/2}^n$. Поточковые переменные и коэффициенты проницаемости среды, отвечающие за перенос в направлении x , будем относить к серединам вертикальных граней расчетных ячеек и обозначать как $s_{i, j+1/2}^n, \sigma_{i, j+1/2}^n$; перенос в направлении y будет определяться потоковыми переменными, относящимися к серединам горизонтальных граней $s_{i+1/2, j}^n, \sigma_{i+1/2, j}^n$.

Считая все сеточные величины на текущем временном слое известными, опишем последовательность реализации одного временного шага балансно-характеристического алгоритма в двумерном случае.

Для вычисления промежуточных значений консервативных переменных используем следующую консервативную схему первого порядка точности по времени:

$$m_{i+1/2,j+1/2} \frac{S^{n+1/2} - S^n}{\tau/2} + \frac{(k_x)_{i+1,j+1/2}^n F(s_{i+1,j+1/2}^n) - (k_x)_{i,j+1/2}^n F(s_{i,j+1/2}^n)}{h_x} + \frac{(k_y)_{i+1/2,j+1}^n F(s_{i+1/2,j+1}^n) - (k_y)_{i+1/2,j}^n F(s_{i+1/2,j}^n)}{h_y} = 0, \quad (2.6.4)$$

где

$$(k_x)_{i,j+1/2}^n = (\sigma_x)_{i,j+1/2} \left[g - \frac{P_{i+1/2,j+1/2}^n - P_{i-1/2,j+1/2}^n}{h_x} \right], \quad (2.6.5)$$

$$(k_y)_{i+1/2,j}^n = -(\sigma_y)_{i+1/2,j} \frac{P_{i+1/2,j+1/2}^n - P_{i+1/2,j-1/2}^n}{h_y}.$$

Некоторые индексы (когда их значения представляются очевидными) здесь опущены.

Новые значения потоковых переменных на новом временном слое, как и в одномерном случае, определяются из линейной экстраполяции. Так, для каждой вертикальной грани расчетной ячейки это дает

$$(\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1} = 2S_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2} - s_{i-1,j+1/2}^n, \quad (2.6.6)$$

$$(\tilde{s}_R)_{i,j+1/2}^{n+1} = 2S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - s_{i+1,j+1/2}^n,$$

где \tilde{s} — предварительное значение потоковой величины.

Для каждой горизонтальной грани находим

$$(\tilde{s}_D)_{i+1/2,j}^{n+1} = 2S_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2} - s_{i+1/2,j-1}^n, \quad (2.6.7)$$

$$(\tilde{s}_U)_{i+1/2,j}^{n+1} = 2S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2} - s_{i+1/2,j+1}^n.$$

Вычисленные таким образом предварительные значения потоковых переменных необходимо подвергнуть коррекции на предмет их соответствия принципу максимума. В двумерном случае границы разрешенного

принципом максимума интервала допустимости значений потоковых переменных будут определяться следующим образом:

$$\begin{aligned} \max_x (s)_{i+1/2, j+1/2}^n &= \max \left[(s)_{i, j+1/2}^n, (s)_{i+1, j+1/2}^n \right] + \tau (Q_x)_{i+1/2, j+1/2}^n, \\ \min_x (s)_{i+1/2, j+1/2}^n &= \min \left[(s)_{i, j+1/2}^n, (s)_{i+1, j+1/2}^n \right] + \tau (Q_x)_{i+1/2, j+1/2}^n, \\ \max_x (s)_{i-1/2, j+1/2}^n &= \max \left[(s)_{i-1, j+1/2}^n, (s)_{i, j+1/2}^n \right] + \tau (Q_x)_{i-1/2, j+1/2}^n, \\ \min_x (s)_{i-1/2, j+1/2}^n &= \min \left[(s)_{i-1, j+1/2}^n, (s)_{i, j+1/2}^n \right] + \tau (Q_x)_{i-1/2, j+1/2}^n, \\ \max_y (s)_{i+1/2, j+1/2}^n &= \max \left[(s)_{i+1/2, j+1}^n, (s)_{i+1/2, j}^n \right] + \tau (Q_y)_{i+1/2, j+1/2}^n, \\ \min_y (s)_{i+1/2, j+1/2}^n &= \min \left[(s)_{i+1/2, j+1}^n, (s)_{i+1/2, j}^n \right] + \tau (Q_y)_{i+1/2, j+1/2}^n, \\ \max_y (s)_{i+1/2, j-1/2}^n &= \max \left[(s)_{i+1/2, j}^n, (s)_{i+1/2, j-1}^n \right] + \tau (Q_y)_{i+1/2, j-1/2}^n, \\ \min_y (s)_{i+1/2, j-1/2}^n &= \min \left[(s)_{i+1/2, j}^n, (s)_{i+1/2, j-1}^n \right] + \tau (Q_y)_{i+1/2, j-1/2}^n, \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} (Q_x)_{i+1/2, j+1/2}^n &= - \frac{(k_y)_{i+1/2, j+1}^n F(s_{i+1/2, j+1}^n) - (k_y)_{i+1/2, j}^n F(s_{i+1/2, j}^n)}{h_y} \\ &\quad - F(s_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2}) \frac{(k_x)_{i+1, j+1/2}^n - (k_x)_{i, j+1/2}^n}{h_x}, \\ (Q_y)_{i+1/2, j+1/2}^n &= - \frac{(k_x)_{i+1, j+1/2}^n F(s_{i+1, j+1/2}^n) - (k_x)_{i, j+1/2}^n F(s_{i, j+1/2}^n)}{h_x} \\ &\quad - F(s_{i+1/2, j+1/2}^{n+1/2}) \frac{(k_y)_{i+1/2, j+1}^n - (k_y)_{i+1/2, j}^n}{h_y}. \end{aligned}$$

Откорректированные значения потоковых переменных со стороны каждой из ячеек будут иметь вид

$$(s_L)_{i,j+1/2}^{n+1} = \begin{cases} (\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1}, & \text{если } \min_x (s)_{i-1/2,j+1/2}^n \leq (\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1} \leq \max_x (s)_{i-1/2,j+1/2}^n, \\ \min_x (s)_{i-1/2,j+1/2}^n, & \text{если } (\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1} < \min_x (s)_{i-1/2,j+1/2}^n, \\ \max_x (s)_{i-1/2,j+1/2}^n, & \text{если } (\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1} > \max_x (s)_{i-1/2,j+1/2}^n, \end{cases}$$

$$(s_R)_{i,j+1/2}^{n+1} = \begin{cases} (\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1}, & \text{если } \min_x (s)_{i+1/2,j+1/2}^n \leq (\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1} \leq \max_x (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, \\ \min_x (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, & \text{если } (\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1} < \min_x (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, \\ \max_x (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, & \text{если } (\tilde{s}_L)_{i,j+1/2}^{n+1} > \max_x (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, \end{cases}$$

$$(s_D)_{i+1/2,j}^{n+1} = \begin{cases} (\tilde{s}_D)_{i+1/2,j}^{n+1}, & \text{если } \min_y (s)_{i+1/2,j-1/2}^n \leq (\tilde{s}_D)_{i+1/2,j}^{n+1} \leq \max_y (s)_{i+1/2,j-1/2}^n, \\ \min_y (s)_{i+1/2,j-1/2}^n, & \text{если } (\tilde{s}_D)_{i+1/2,j}^{n+1} < \min_y (s)_{i+1/2,j-1/2}^n, \\ \max_y (s)_{i+1/2,j-1/2}^n, & \text{если } (\tilde{s}_D)_{i+1/2,j}^{n+1} > \max_y (s)_{i+1/2,j-1/2}^n, \end{cases}$$

$$(s_U)_{i+1/2,j}^{n+1} = \begin{cases} (\tilde{s}_U)_{i+1/2,j}^{n+1}, & \text{если } \min_y (s)_{i+1/2,j+1/2}^n \leq (\tilde{s}_U)_{i+1/2,j}^{n+1} \leq \max_y (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, \\ \min_y (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, & \text{если } (\tilde{s}_U)_{i+1/2,j}^{n+1} < \min_y (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, \\ \max_y (s)_{i+1/2,j+1/2}^n, & \text{если } (\tilde{s}_U)_{i+1/2,j}^{n+1} > \max_y (s)_{i+1/2,j+1/2}^n. \end{cases}$$

Окончательные величины потоковых переменных на границах расчетных ячеек находятся из принципа наименьшего возрастания локальных вариаций консервативных переменных по каждому из направлений. В направлении оси x это выражается в следующей алгоритмической процедуре.

Вычислим максимальные и минимальные значения потока на отрезке

$$\left[(s_R)_{i,j+1/2}^{n+1}, (s_L)_{i,j+1/2}^{n+1} \right]:$$

$$\max F_x = \max_{s \in \left[(s_R)_{i,j+1/2}^{n+1}, (s_L)_{i,j+1/2}^{n+1} \right]} \left[k_x F(s) \right], \quad \min F_x = \min_{s \in \left[(s_R)_{i,j+1/2}^{n+1}, (s_L)_{i,j+1/2}^{n+1} \right]} \left[k_x F(s) \right].$$

Обозначим через s_{\max}^x, s_{\min}^x те значения, при которых достигаются максимальный и минимальный потоки соответственно. Тогда новые потоковые переменные определяются так:

$$s_{i,j+1/2}^{n+1} = \begin{cases} s_{\max}^x, & \text{если } S_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2} \geq S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \\ s_{\min}^x, & \text{если } S_{i-1/2,j+1/2}^{n+1/2} < S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}. \end{cases} \quad (2.6.8)$$

Для направления y все совершенно аналогично:

$$s_{i+1/2,j}^{n+1} = \begin{cases} s_{\max}^y, & \text{если } S_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2} \geq S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \\ s_{\min}^y, & \text{если } S_{i+1/2,j-1/2}^{n+1/2} < S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1/2}, \end{cases} \quad (2.6.9)$$

где s_{\max}^y, s_{\min}^y представляют собой значения, при которых достигаются максимальное и минимальное значения потоков:

$$\max F_y = \max_{s \in [(s_D)_j^{n+1}, (s_U)_j^{n+1}]} [k_y F(s)], \quad \min F_y = \min_{s \in [(s_D)_j^{n+1}, (s_U)_j^{n+1}]} [k_y F(s)]$$

на интервале $[(s_D)_{i+1/2,j}^{n+1}, (s_U)_{i+1/2,j}^{n+1}]$, допускаемом принципом максимума.

Завершается балансно-характеристический алгоритм вычислением новых значений консервативных переменных $S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1}$ и давлений $P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1}$, обеспечивающих выполнение ограничивающих неравенств $0 \leq S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} \leq 1$. Базовым здесь является разностное уравнение

$$\begin{aligned} & m_{i+1/2,j+1/2} \frac{S^{n+1} - S^{n+1/2}}{\tau/2} + \\ & + \frac{(k_x)_{i+1,j+1/2}^{n+1} F(s_{i+1,j+1/2}^{n+1}) - (k_x)_{i,j+1/2}^{n+1} F(s_{i,j+1/2}^{n+1})}{h_x} + \\ & + \frac{(k_y)_{i+1/2,j+1}^{n+1} F(s_{i+1/2,j+1}^{n+1}) - (k_y)_{i+1/2,j}^{n+1} F(s_{i+1/2,j}^{n+1})}{h_y} = 0, \end{aligned} \quad (2.6.10)$$

где

$$\begin{aligned} (k_x)_{i,j+1/2}^{n+1} &= (\sigma_x)_{i,j+1/2} \left[g - \frac{P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} - P_{i-1/2,j+1/2}^{n+1}}{h_x} \right], \\ (k_y)_{i+1/2,j}^{n+1} &= -(\sigma_y)_{i+1/2,j} \frac{P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} - P_{i+1/2,j-1/2}^{n+1}}{h_y}. \end{aligned}$$

Уравнение (2.6.10), как и (2.6.4), аппроксимирует исходный дифференциальный закон сохранения со вторым порядком по пространственным переменным и с первым порядком по времени. Однако если сложить (2.6.10) и (2.6.4), мы приходим к разностному уравнению

$$\begin{aligned}
 & m_{i+1/2, j+1/2} \frac{S^{n+1} - S^n}{\tau} + \\
 & + \frac{1}{2} \left\{ \frac{(k_x)_{i+1, j+1/2}^{n+1} F(s_{i+1, j+1/2}^{n+1}) - (k_x)_{i, j+1/2}^{n+1} F(s_{i, j+1/2}^{n+1})}{h_x} + \right. \\
 & + \frac{(k_x)_{i+1, j+1/2}^n F(s_{i+1, j+1/2}^n) - (k_x)_{i, j+1/2}^n F(s_{i, j+1/2}^n)}{h_x} + \\
 & + \frac{(k_y)_{i+1/2, j+1}^{n+1} F(s_{i+1/2, j+1}^{n+1}) - (k_y)_{i+1/2, j}^{n+1} F(s_{i+1/2, j}^{n+1})}{h_y} + \\
 & \left. + \frac{(k_y)_{i+1/2, j+1}^n F(s_{i+1/2, j+1}^n) - (k_y)_{i+1/2, j}^n F(s_{i+1/2, j}^n)}{h_y} \right\} = 0, \quad (2.6.11)
 \end{aligned}$$

аппроксимирующему исходное со вторым порядком точности.

Ранее на примере одномерных уравнений было показано, что давление отлично от нуля только в тех ячейках, где консервативные переменные влагосодержания выходят за допустимые пределы.

Для решения неявного уравнения (2.6.10) при ограничениях используем итерационный процесс:

$$\begin{aligned}
 & m \frac{[S^{n+1}]^{v+1} - S^{n+1/2}}{\tau/2} + \\
 & + \frac{[(k_x)_{i+1, j+1/2}^{n+1}]^v F(s_{i+1, j+1/2}^{n+1}) - [(k_x)_{i, j+1/2}^{n+1}]^v F(s_{i, j+1/2}^{n+1})}{h_x} + \quad (2.6.12) \\
 & + \frac{[(k_y)_{i+1/2, j+1}^{n+1}]^v F(s_{i+1/2, j+1}^{n+1}) - [(k_y)_{i+1/2, j}^{n+1}]^v F(s_{i+1/2, j}^{n+1})}{h_y} = 0,
 \end{aligned}$$

$$\left[(k_x)_{i,j+1/2}^{n+1} \right]^v = (\sigma_x)_{i,j+1/2} \left\{ g - \frac{\left[P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} \right]^v - \left[P_{i-1/2,j+1/2}^{n+1} \right]^v}{h_x} \right\},$$

$$\left[(k_y)_{i+1/2,j}^{n+1} \right]^v = -(\sigma_y)_{i+1/2,j} \frac{\left[P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} \right]^v - \left[P_{i+1/2,j-1/2}^{n+1} \right]^v}{h_y},$$

где v — номер итерации. Будем считать, что

$$\left[(k_x)_{i+1,j+1/2}^{n+1} \right]^0 = (k_x)_{i+1,j+1/2}^n, \quad \left[(k_y)_{i+1/2,j}^{n+1} \right]^0 = (k_y)_{i+1/2,j}^n.$$

Отклонение влагосодержания от допустимых пределов в каждой расчетной ячейке характеризуется величиной

$$\begin{aligned} (\Delta S)^{v+1} = & \frac{\left[1 - \text{sign} \left(1 - \left[S^{n+1} \right]^v \right) \right]}{2} \left(1 - \left[S^{n+1} \right]^v \right) - \\ & - \frac{\left[1 - \text{sign} \left(\left[S^{n+1} \right]^v \right) \right]}{2} \left[S^{n+1} \right]^v. \end{aligned} \quad (2.6.13)$$

Если отклонение отрицательно, вычисленное влагосодержание превышает единицу, если положительно — оно меньше нуля.

Если после нулевой итерации все отклонения $(\Delta S)_{i+1/2,j+1/2}^1 \equiv 0$, то итерационный процесс на этом заканчивается, и в качестве решения получаем

$$S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} = \left[S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} \right]^0, \quad P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} = 0.$$

Если итерационный процесс продолжается и после очередной итерации $(\Delta S)_{i+1/2,j+1/2}^{v+1} \equiv 0$, то итерации также заканчиваются и в качестве решения принимается

$$S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} = \left[S_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} \right]^v, \quad P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} = \left[P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} \right]^v.$$

Если же $(\Delta S)_{i+1/2,j+1/2}^{v+1} \neq 0$, то новое приближение для давлений $\left[P_{i+1/2,j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1}$ находится из требования обнуления величин $(\Delta S)_{i+1/2,j+1/2}^{v+1}$, приводящего к уравнению

$$\begin{aligned}
 & m \frac{(\Delta S)^{v+1}}{\tau/2} + \\
 & + \frac{\delta \left[(k_x)_{i+1, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} F(s_{i+1, j+1/2}^{n+1}) - \delta \left[(k_x)_{i, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} F(s_{i, j+1/2}^{n+1})}{h_x} + \\
 & + \frac{\delta \left[(k_y)_{i+1/2, j+1}^{n+1} \right]^{v+1} F(s_{i+1/2, j+1}^{n+1}) - \delta \left[(k_y)_{i+1/2, j}^{n+1} \right]^{v+1} F(s_{i+1/2, j}^{n+1})}{h_y} = 0,
 \end{aligned} \tag{2.6.14}$$

где

$$\begin{aligned}
 \left[(k_x)_{i, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} &= \left[(k_x)_{i, j+1/2}^{n+1} \right]^v + \delta \left[(k_x)_{i, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1}, \\
 \left[(k_y)_{i+1/2, j}^{n+1} \right]^{v+1} &= \left[(k_y)_{i+1/2, j}^{n+1} \right]^v + \delta \left[(k_y)_{i+1/2, j}^{n+1} \right]^{v+1}, \\
 \delta \left[(k_x)_{i, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} &= - \frac{\delta \left[P_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} - \delta \left[P_{i-1/2, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1}}{h_x}, \\
 \delta \left[(k_y)_{i+1/2, j}^{n+1} \right]^{v+1} &= - \frac{\delta \left[P_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} - \delta \left[P_{i+1/2, j-1/2}^{n+1} \right]^{v+1}}{h_y}, \\
 \delta \left[P_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} &= \left[P_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} - \left[P_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} \right]^v.
 \end{aligned}$$

Действительно, если уравнение (2.6.12) сложить с (2.6.14), получим

$$\begin{aligned}
 & m \frac{\left[S^{n+1} \right]^* - S^{n+1/2}}{\tau/2} + \\
 & + \frac{\left[(k_x)_{i+1, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} F(s_{i+1, j+1/2}^{n+1}) - \left[(k_x)_{i, j+1/2}^{n+1} \right]^{v+1} F(s_{i, j+1/2}^{n+1})}{h_x} + \\
 & + \frac{\left[(k_y)_{i+1/2, j+1}^{n+1} \right]^{v+1} F(s_{i+1/2, j+1}^{n+1}) - \left[(k_y)_{i+1/2, j}^{n+1} \right]^{v+1} F(s_{i+1/2, j}^{n+1})}{h_y} = 0,
 \end{aligned} \tag{2.6.15}$$

где

$$[S^{n+1}]^* = \begin{cases} 1, & \text{если } (\Delta S)^{v+1} < 0, \\ 0, & \text{если } (\Delta S)^{v+1} > 0, \end{cases}$$

и, стало быть, все необходимые ограничения окажутся выполненными.

Уравнение (2.6.14) представляет собой разностное уравнение эллиптического типа с пятидиагональной разреженной матрицей, для численного решения которого необходимо использовать эффективные итерационные методы.

2.6.3. Протекание по двумерным перколяционным решеткам. Гидростатическое приближение

При решении уравнения (2.6.3) с ограничениями (2.6.2) на перколяционных решетках, проницаемость граней которых равна либо нулю, либо заданной фиксированной величине, описанный выше алгоритм существенно упрощается за счет более простого алгоритма учета ограничений. Как уже отмечалось, при возникновении на пути потока влаги непреодолимого препятствия выстраивается гидростатический столб, давление которого и создает необходимую для выполнения ограничений (2.6.2) реакцию. Соответствующее приближение будем называть гидростатическим.

В гидростатическом приближении вышеописанный алгоритм модифицируется следующим образом.

Этап вычисления промежуточных значений консервативных переменных и вычисление новых значений потоковых переменных в формулах (2.6.4)—(2.6.9) остаются без изменений. Изменится блок вычисления новых значений консервативных переменных и новых значений давления.

В гидростатическом приближении новые консервативные переменные вычисляются в три этапа. Вначале находятся предварительные значения $\tilde{S}_{i+1/2}^{n+1}$ по явной схеме:

$$m_{i+1/2, j+1/2} \frac{\tilde{S}^{n+1} - S^{n+1/2}}{\tau/2} + \frac{(k_x)^n_{i+1, j+1/2} F(s_{i+1, j+1/2}^{n+1}) - (k_x)^n_{i, j+1/2} F(s_{i, j+1/2}^{n+1})}{h_x} + \frac{(k_y)^n_{i+1/2, j+1} F(s_{i+1/2, j+1}^{n+1}) - (k_y)^n_{i+1/2, j} F(s_{i+1/2, j}^{n+1})}{h_y} = 0,$$

где

$$\begin{aligned} (k_x)^n_{i,j+1/2} &= (\sigma_x)_{i,j+1/2} \left[g - \frac{P^n_{i+1/2,j+1/2} - P^n_{i-1/2,j+1/2}}{h_x} \right], \\ (k_y)^n_{i+1/2,j} &= -(\sigma_y)_{i+1/2,j} \frac{P^n_{i+1/2,j+1/2} - P^n_{i+1/2,j-1/2}}{h_y}. \end{aligned}$$

Затем выстраивается следующее приближение, удовлетворяющее требованию положительности решения.

Вдоль каждого сеточного ряда в направлении оси x проводится процедура:

$$\begin{aligned} &\text{если } (\tilde{S}^{n+1}_{i+1/2,j+1/2} < 0), \text{ то} \\ &\tilde{S}^{n+1}_{i+3/2,j+1/2} = \tilde{S}^{n+1}_{i+3/2,j+1/2} + \tilde{S}^{n+1}_{i+1/2,j+1/2}; \\ &\tilde{S}^{n+1}_{i+1/2,j+1/2} = 0; \tag{2.6.16} \\ &\text{в противном случае} \\ &\tilde{S}^{n+1}_{i+1/2,j+1/2} = \tilde{S}^{n+1}_{i+1/2,j+1/2}. \end{aligned}$$

в результате которой происходит устранение отрицательных значений при сохранении общего баланса.

На последнем, третьем, этапе обратным ходом вдоль каждого сеточного ряда по оси x находятся окончательные значения консервативных переменных $S^{n+1}_{i+1/2,j+1/2}$, удовлетворяющие условию $0 \leq S^{n+1}_{i+1/2,j+1/2} \leq 1$:

$$\begin{aligned} &\text{если } (\tilde{S}^{n+1}_{i+1/2,j+1/2} > 1), \text{ то} \\ &\tilde{S}^{n+1}_{i-1/2,j+1/2} = \tilde{S}^{n+1}_{i-1/2,j+1/2} + \tilde{S}^{n+1}_{i+1/2,j+1/2} - 1; \\ &S^{n+1}_{i+1/2,j+1/2} = 1; \tag{2.6.17} \\ &\text{в противном случае} \\ &S^{n+1}_{i+1/2,j+1/2} = \tilde{S}^{n+1}_{i+1/2,j+1/2}. \end{aligned}$$

В результате этой процедуры излишки влагосодержания перебрасываются в ближайшую ячейку в направлении, противоположном силе тяжести, что приводит к выстраиванию над каждым барьером гидростатического столба. Следует отметить, что для простоты изложения в процедурах (2.6.16) и (2.6.17) пористость полагается постоянной и в (2.6.17) не учтена ситуация, когда верхняя ячейка отделена от нижней непроницаемым барьером.

Новое давление $P_{i+1/2, j+1/2}^{n+1}$ в гидростатических столбах вычисляется следующим образом:

$$\begin{aligned} &\text{если } (S_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} = 1), \text{ то} \\ &(P_c)_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} = (P_c)_{i-1/2, j+1/2}^{n+1} + g\rho_w h_x; \\ &\text{в противном случае} \\ &(P_c)_{i+1/2, j+1/2}^{n+1} = 0. \end{aligned}$$

Каждый из описанных этапов реализуется одним проходом по расчетной сетке и требует относительно малого количества арифметических операций. Таким образом, можно сказать, что алгоритм гидростатического приближения является явным. Практика расчетов показывает, что при выборе шага интегрирования по времени из условия

$$\max_{i,j} \left\{ \frac{|(k_x)_{i, j+1/2}^{n+1}| \tau_{n+1}}{h_x}, \frac{|(k_y)_{i, j+1/2}^{n+1}| \tau_{n+1}}{h_y} \right\} \leq \frac{1}{2}$$

алгоритм устойчив.

2.6.4. Тестовые задачи

1. Протекание по перколяционной решетке 50×50 с перколяционным параметром $\eta = 0,5$, $CFL = 0,45$.

Рассмотрим задачу о протечке влаги на перколяционной решетке размером 50×50 ячеек. Для простоты вместо функции потоков (2.5.17) рассмотрим квадратичную функцию Хопфа, а пористость будем считать постоянной и равной единице. Предположим, что исходное влагосодержание в области равно нулю. На левой границе единичного квадрата поддерживается постоянное влагосодержание $s_y = 0,4$, на верхней и нижней границах — нулевые потоки, на правой границе — нулевое значение влагосодержания. Перколяционный порог, при превышении которого на двумерной решетке образуется бесконечный перколяционный кластер, отвечает перколяционному параметру $\eta^* = 0,5$ (см. раздел 2.4). В нашем примере $\eta = 0,5$, т. е. перколяционные пути, соединяющие левую и правую границы области, могут возникнуть, а могут и не возникнуть. На **рис. 2.4.6а**, **2.4.6б** приведены распределения абсолютных проницаемостей в направлениях x и y , отвечающие рассматриваемому примеру.

На **рис. 2.4.6в** представлена зона «промокаемости», демонстрирующая отсутствие гидравлической связи между левой и правой границами.

На **рис. 2.6.1—2.6.3** приведены концентрации влаги и давление в динамическом процессе заполнения порового пространства на различные моменты времени. Видно, что в этой реализации перколяционной решетки протекание отсутствует.

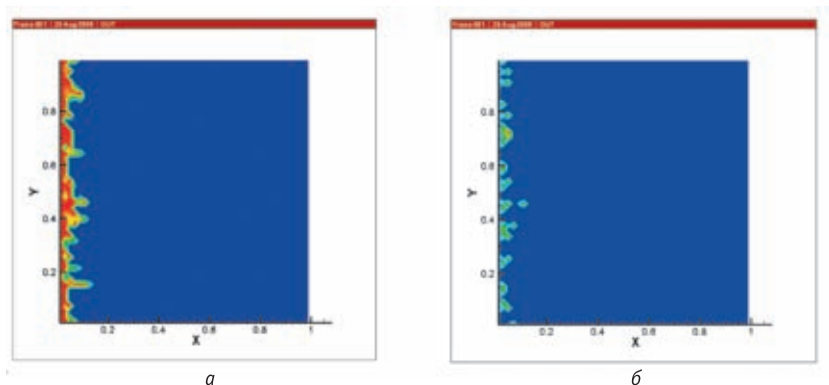


Рис. 2.6.1. Влагосодержание (а) и давление (б). NT = 80

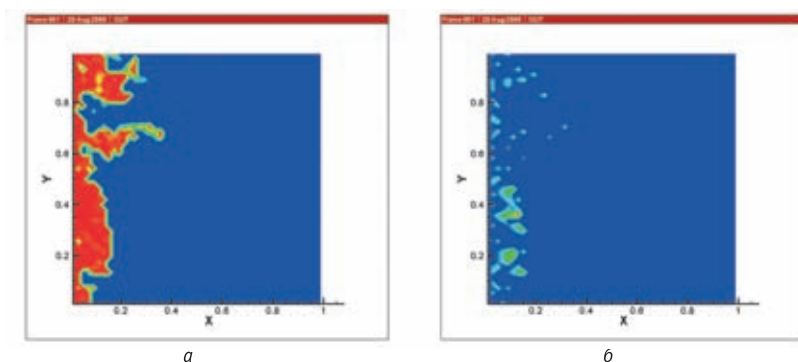


Рис. 2.6.2. Влагосодержание (а) и давление (б). NT = 2000

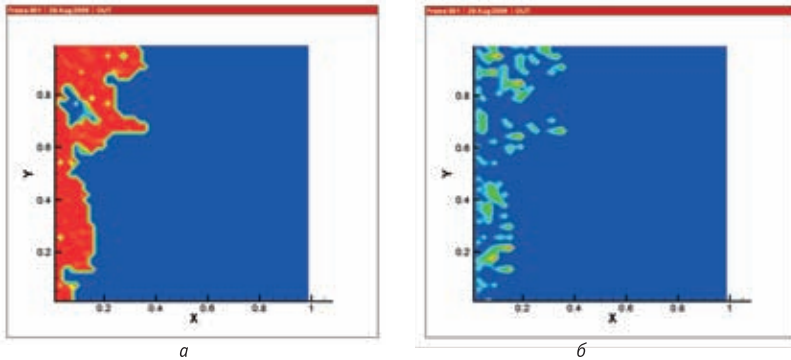


Рис. 2.6.3. Влагосодержание (а) и давление (б). $NT = 8000$

2. Протекание по перколяционной решетке 50×50 с перколяционным параметром $\eta = 0,6$, $CFL = 0,45$.

Постановка этой задачи отличается от предыдущей только значением перколяционного параметра, который все еще находится под порогом перколяции, но в рассматриваемой реализации случайного процесса формирования решетки возникли перколяционные пути, соединяющие левую и правую границы, что видно из рис. 2.4.7в. На рис. 2.4.7а и 2.4.7б приведены распределения проницаемостей на данной решетке по направлениям x и y соответственно. На рис. 2.6.4—2.6.6 приведены линии уровня влагосодержания и давления в динамическом процессе на различные моменты времени.

В рассмотренной реализации перколяционной решетки влага достигает правой границы области.

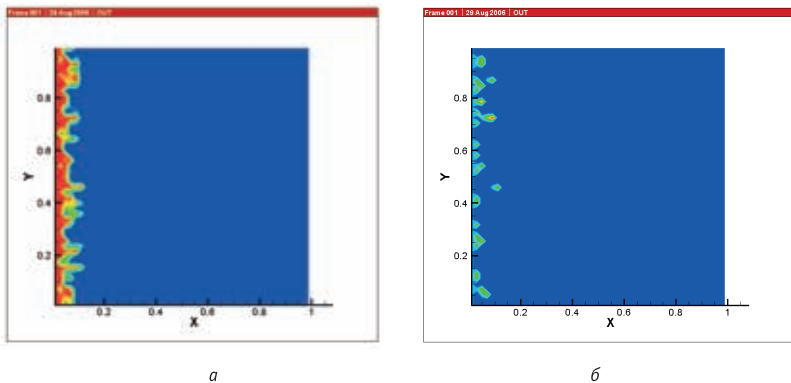


Рис. 2.6.4. Влагосодержание (а) и давление (б). $NT = 80$

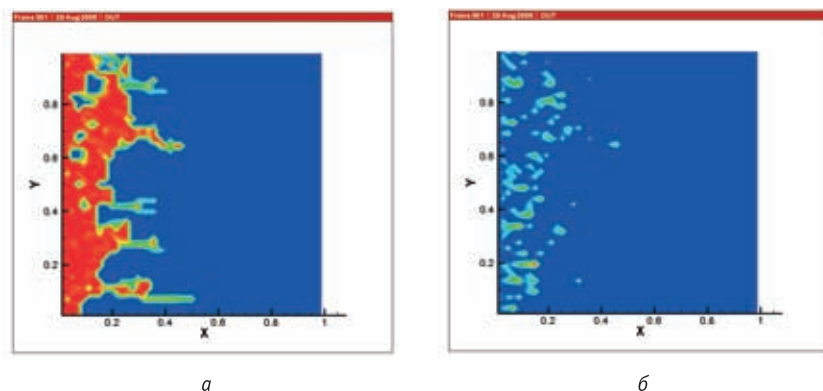


Рис. 2.6.5. Влажесодержание (а) и давление (б). NT = 2000

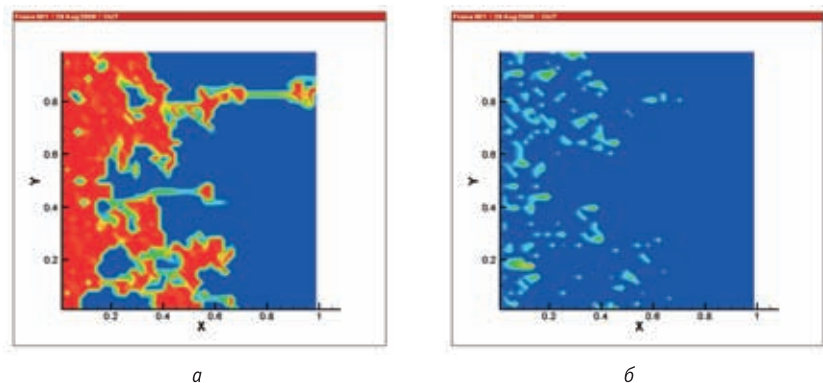


Рис. 2.6.6. Влажесодержание (а) и давление (б). NT = 8000

3. Протекание по перколяционной решетке 200×200 с перколяционным параметром $\eta = 0,6$, CFL=0,45.

Этот пример отличается от предыдущего только размером перколяционной сетки — здесь она значительно более подробная. На рис. 2.6.7 представлено распределение проницаемости σ_x , на рис. 2.6.8 — σ_y , на рис. 2.6.9 — конфигурация зоны промокаемости.

Динамика протечки влаги с левой границы области до правой изображена на рис. 2.6.10—2.6.16.

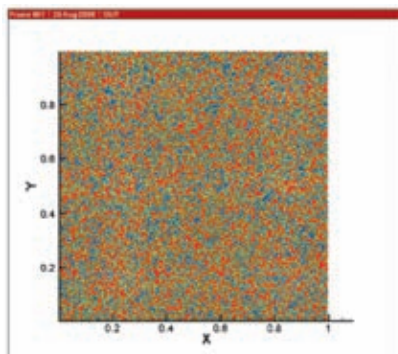


Рис. 2.6.7. Коэффициент σ_x

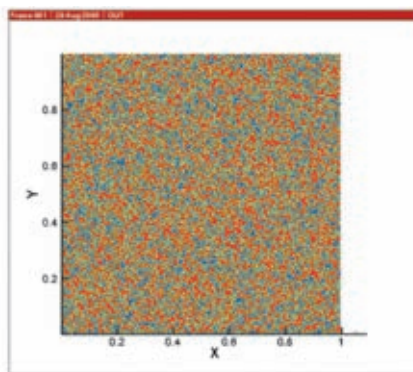


Рис. 2.6.8. Коэффициент σ_y

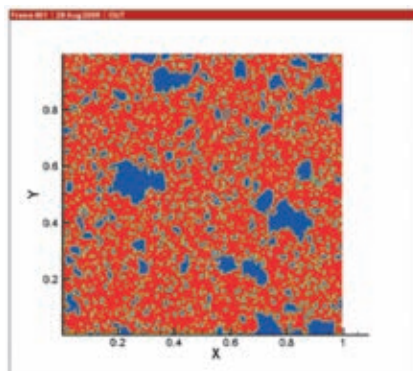


Рис. 2.6.9. Область промокаемости

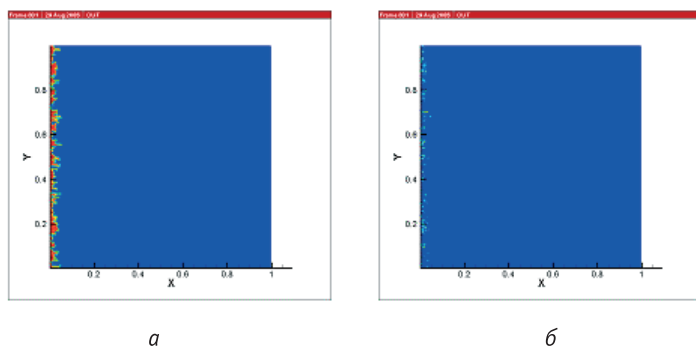


Рис. 2.6.10. Влажность (а) и давление (б). NT = 300

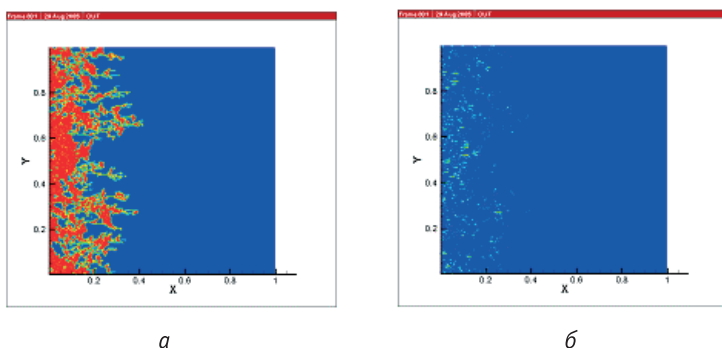


Рис. 2.6.11. Влажность (а) и давление (б). NT = 30 000

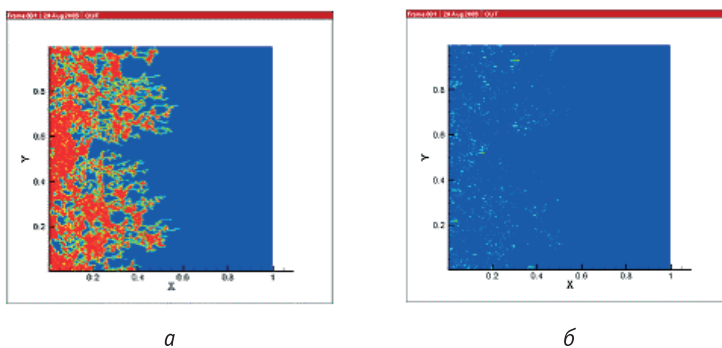
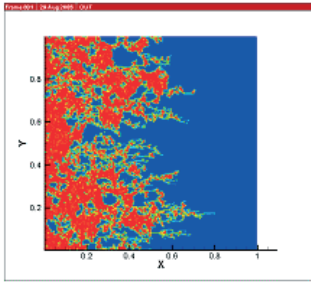
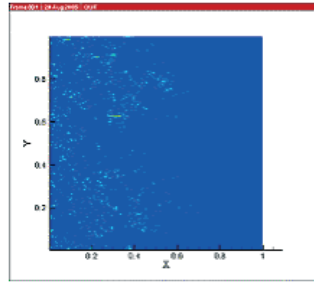


Рис. 2.6.12. Влажность (а) и давление (б). NT = 60 000

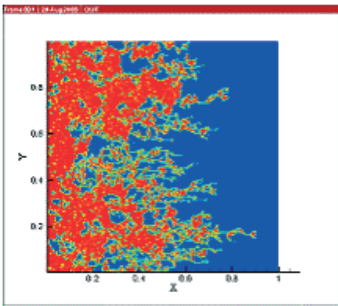


a

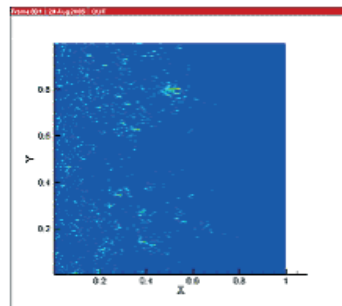


б

Рис. 2.6.13. Влажность (*a*) и давление (*б*). $NT = 90\ 000$

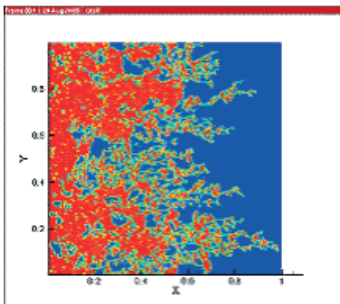


a

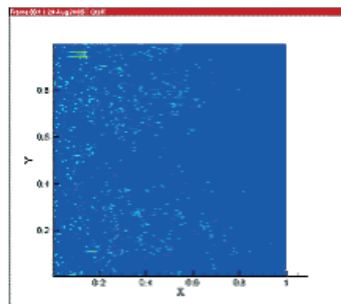


б

Рис. 2.6.14. Влажность (*a*) и давление (*б*). $NT = 120\ 000$



a



б

Рис. 2.6.15. Влажность (*a*) и давление (*б*). $NT = 150\ 000$

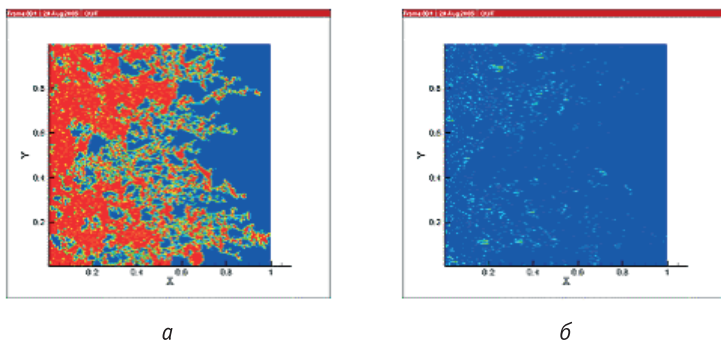


Рис. 2.6.16. Влажность (а) и давление (б). NT = 180 000

Выводы по разделам 2.3—2.6

Разделы 2.3—2.6 посвящены разработке эффективного математического аппарата для прямого стохастического моделирования процессов просачивания с целью выявления новых макроскопических закономерностей, которые могут быть положены в основу более простых осредненных моделей.

Остановимся на математической модели просачивания влаги под действием сил тяжести в зоне аэрации с учетом капиллярных сил. Математические особенности задачи в незавуалированном виде проявляются при отсутствии газовой среды, т. е. при просачивании в условиях вакуума. Этим особенностям две. Первая заключается в том, что квазилинейное дифференциальное уравнение в частных производных относительно функции влагонасыщенности дополняется недифференциальной связью, ограничивающей значения искомым функции сверху. Вторая особенность состоит в нелинейности ненасыщенных потоков, определяемых балансом сил трения и сил тяжести.

Влагонасыщенность не может быть больше единицы и не может быть отрицательной. Наличие этих естественных условий порождает серьезные вычислительные трудности, которые проявляются тем сильнее, чем более неоднородно поле проницаемости. При постоянной проницаемости для решения выполняется принцип максимума, и значения влагонасыщенности внутри области не могут превышать ее значений на входной границе. При вариации проницаемости значения максимумов внутри области могут превышать граничные значения, но если на границе области максимумы много меньше единицы и вариации проницаемости ограничены, решение все еще может оставаться в естественных пределах, т. е. упомянутая трудность не будет проявляться вообще. В сильнонеоднородных средах перепады проницаемости ничем не ограничены и могут достигать сколь угодно

больших значений, поэтому недифференциальные неудерживающие ограничения начинают играть доминирующую роль. Ситуация здесь чем-то напоминает классическую задачу о динамике двух тел, связанных идеальной нерастяжимой нитью. Пока расстояние между телами меньше длины нити, ее присутствие не сказывается, но как только расстояние сравняется с ее длиной, возникшие силы реакции кардинально изменят характер движения. Другая, более близкая аналогия — контактные задачи теории упругости.

При аккуратном учете газовой компоненты указанная проблема в ряде случаев может оказаться менее острой, и задачи просачивания в зонах неполного влагонасыщения при некоторых ограничениях на граничные условия, перепад проницаемостей, а также искусственном введении особенности в коэффициент капиллярной диффузии можно решать и стандартными методами. Однако область существования таких постановок достаточно узка, и для регулярного и надежного исследования закономерностей протечек влаги в трещиновато-пористых средах с плохо проводящей матрицей такие методы малопригодны.

Описанный в настоящей монографии алгоритм учета ограничений на влагонесодержание посредством аккуратного вычисления сил реакции (давления) применим для сколь угодно неоднородных сред, однако для его реализации на каждом временном шаге необходимо решать систему нелинейных сильно вырожденных и плохо обусловленных эллиптических сеточных уравнений. Такого рода алгоритмы могут быть доведены до высокой степени совершенства, однако нам представляется более интересным другой путь.

Допустим, что плохо проводящая матрица является совершенно однородной. Тогда при отсутствии сетей трещин просачивание влаги по такой матрице описывается уравнением нелинейной конвекции-диффузии, для которого будет выполняться принцип максимума, и влагонесодержание всегда будет оставаться неотрицательной величиной, меньшей единицы. Сети трещин, имеющие фрактальную структуру, естественно моделировать перколяционными решетками, вложенными в однородную матрицу и взаимодействующими друг с другом и матрицей посредством капиллярных сил. Простейший случай — одна перколяционная решетка в однородной матрице.

При построении перколяционной решетки в среде строится прямоугольная сетка и разыгрывается случайный процесс (равномерно распределенная на единичном отрезке случайная величина), определяющий проницаемость ее граней. Каждая грань оказывается либо проводящей (проницаемость равна единице), либо нет (проницаемость равна нулю) в зависимости от того, меньше или больше перколяционного параметра донной решетки $\eta_k < 1$ окажется разыгранная величина. Затем единичная проницаемость нормируется на характерную проницаемость сети трещин моделируемой среды.

Как было показано выше, при изменении проницаемости в бесконечное число раз задача нахождения сил реакции существенно упрощается и сводится к поиску давления в выстраивающихся гидростатических столбах.

При сложной структуре сетей трещин вместо одной перколяционной решетки можно рассмотреть набор решеток, характеризующийся разными перколяционными параметрами и, вообще говоря, различными размерами ячеек. Выше размеры всех ячеек полагались для простоты одинаковыми. Протекание по каждой решетке осуществляется независимо, и для одной решетки данная грань может оказаться проводящей, а для другой — нет. Обмен влагой между решетками осуществляется только посредством капиллярных сил. Переход от двумерных перколяционных решеток к трехмерным принципиальных затруднений не вызывает.

Серьезной самостоятельной проблемой является решение динамических задач протекания на перколяционных решетках. Эта проблема была успешно решена на базе использования балансно-характеристических разностных схем.

Литература

1. *Uchaikin V. V., Gusarov G. G.* Lévy flight applied to random media problems // *J. Math. Phys.* — 1997. — Vol. 38. — P. 2453—2464.
2. *Isichenko M. B.* Percolation, statistical topography and transport in random media // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — Vol. 64. — P. 961—1043.
3. *Bouchard J. P.* More Lévy distribution physics // *Lévy flights and related topics in physics.* — Berlin: Springer, 1995. — P. 239—250.
4. *Bouchard J. P., Georges A.* Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanics, model and physical application // *Phys. Rep.* — 1990. — Vol. 195. — P. 127—293.
5. *Klafter J., Shlesinger M. F., Zumofen G.* Beyond Brownian motion // *Physics Today.* — 1996. — Feb. — P. 33—39.
6. *Shlesinger M. F., Klafter J., Wong Y. M.* Random walks with infinite spatial and temporal moments // *J. Stat. Phys.* — 1982. — Vol. 27. — P. 499—512.
7. *Shlesinger M. F., Zaslavsky G. M., Klafter J.* Strange kinetics // *Nature.* — 1993. — Vol. 336. — P. 31—37.
8. *Uchaikin V. V., Zolotarev V. M.* Chance and stable distribution and their applications. — Utrecht: VSP, 1999. — 594 p.
9. *Феллер В.* Введение в теорию вероятности. — Т. 2. — М.: Наука, 1987. — 752 с.
10. *Saichev A. I., Zaslavsky G. M.* Fractional kinetic equations: Solutions and applications // *J. Chaos.* — 1997. — Vol. 7. — P. 753—764.

11. *Kanter M.* Stable densities under change of scale and total variation inequalities // *Ann. Probab.* — 1975. — Vol. 3. — P. 697—707.
12. *Chambers J. M., Mallows C. L., Stuck B. W.* A method for simulations stable random variables // *J. Amer. Statist. Assoc.* — 1976. — Vol. 71. — P. 340—344.
13. *Mantegna R. N.* Fast accurate algorithm for numerical simulation of Lévy stable processes // *Phys. Rev. E.* — 1994. — Vol. 49. — P. 4677—4683.
14. *Головизнин В. М., Сороковикова О. С., Мелькина М. К., Короткин И. А.* Стохастический подход к моделированию распространения примеси в трещиноватых и сильнонеоднородных средах: Связь стохастического моделирования и подходов, использующих уравнения дробной диффузии. — М., 2005. — 34 с. — (Препринт / ИБРАЭ РАН; № ИВРАЕ-2005-02).
15. *Самко С. Г., Килбас А. А., Маричев О. И.* Интегралы и производные дробного порядка и некоторые их приложения. — Минск: Наука и техника, 1987. — 688 с.
16. *Нахушев А. М.* Элементы дробного исчисления и их применение. — Нальчик: Изд-во КБНЦ РАН, 2000. — 299 с.
17. *Fractional Calculus and its Applications, lecture notes in mathematics / Ross B. (ed.).* — Berlin: Springer-Verl., 1975.
18. *Нахушев А. М.* Уравнения математической биологии. — М.: Высш. шк., 1995. — 301 с.
19. *Динариев О. Ю.* Фильтрация в трещиноватой среде с фрактальной геометрией трещин // *Механика жидкости и газа.* — 1990. — № 5. — С. 66—70.
20. *Кочубей А. Н.* Диффузия дробного порядка // *Дифференц. уравнения.* — 1990. — Т. 26, № 4. — С. 660—670.
21. *Mainardi F.* *Fractals and Fractional Calculus in Continuum Mechanics // CISM Courses and Lectures / Eds. A. Carpinteri and F. Mainardi.* — Wien: Springer-Verl., 1997. — P. 291—348.
22. *Montroll E. W., Weiss G. H.* Random walks on lattices // *J. Mathematical Phys.* — 1965. — Vol. 6. — P. 167—181.
23. *Benson D.* *The Fractional Advection-Dispersion Equation: Development and Application: A dissertation submitted in partial fulfillment of the Doctor of Philosophy in Hydrogeology / Univ. of Nevada.* — Reno, 1998.
24. *Schumer R., Benson D., Meerschaert M., Wheatcraft S.* Eulerian derivation of the fractional advection-dispersion equation // *J. Contaminant Hydrology.* — 2001. — Vol. 38 (1/2). — P. 69—88.
25. *Головизнин В. М., Киселев В. П., Короткин И. А., Юрков Ю. И.* Некоторые особенности вычислительных алгоритмов для уравнения дробной диффузии. — М., 2002. — 57 с. — (Препринт / ИБРАЭ РАН; № ИВРАЕ-2002-01).

26. Головизнин В. М., Киселев В. П., Короткин И. А. Численные методы решения уравнения дробной диффузии в одномерном случае. — М., 2002. — 35 с. — (Препринт / ИБРАЭ РАН; № IBRAE-2002-10).
27. Benson D., Schumer R., Meerschaert M., Wheatcraft W. Fractional dispersion, Lévy Motion, and the MADE Tracer tests // <http://www.hydro.unr.edu/hooome/pages/benson>.
28. Головизнин В. М., Киселев В. П., Короткин И. А. Численные методы решения уравнения диффузии с дробной производной по времени в одномерном случае. — М., 2003. — (Препринт / ИБРАЭ РАН; № IBRAE-2003-12).
29. Самарский А. А., Николаев Е. С. Методы решения сеточных уравнений. — М.: Наука, 1978. — 588 с.
30. Селяков В. И., Кадет В. В. Перколяционные модели процессов переноса в микронеоднородных средах. — М.: Недра, 1995. — 222 с.
31. Баренблат Г. И., Ентов В. М., Рыжик В. М. Движение жидкостей и газов в пористых пластах. — М.: Недра, 1984. — 224 с.
32. Самсонов Б. Г., Самсонова Л. М. Миграция вещества и решение гидро-геологических задач. — М.: Недра, 1987. — 118 с.
33. Коновалов А. Н. Задачи фильтрации многофазной несжимаемой жидкости. — Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1988. — 166 с.
34. Pruess K. A mechanistic model water seepage through thick unsaturated zones in fractured rocks of low matrix permeability // *Water Resources Research*. — 1999. — Vol. 35, № 4. — P. 1039—1051.
35. Gwo J. P., Jardine P. M., Wilson G. V., Yeh G. T. Using a multiregion model to study the effect of advective and diffusive mass transfer on local physical nonequilibrium and solute mobility in a structured soil // *Water Resources Research*. — 1996. — Vol. 32 (3). — P. 561—570.
36. Mohanty B. P., Bowman R. S., Hendrickx J. M. et al. New piecewise — continuous hydraulic functions for modeling preferential flow in intermittent-flood-arranged field // *Water Resources Research*. — 1997. — Vol. 33 (9). — P. 2049—2063.
37. Jiang G.-S., Leavy D., Osher S., Tadmor E. High-Resolution Non-Oscillatory Central Schemes with Non-Staggered Grids for Hyperbolic Conservation Laws // *SIAM J. on Numerical Analysis*. — 1998. — Vol. 35, № 6. — P. 2147—2148.
38. Sheu T. W. H., Wang S. K., Tsai S. F. Development of a High-Resolution Scheme for a Mlti-dimensional Advection-Diffusion Equation // *J. Comput. Phys*. — 1998. — Vol. 144. — P. 11—16.
39. Yavneh I. Analysis of a Fourth-Order Compact Scheme for Convection-Diffusion // *J. Comput. Phys*. — 1997. — Vol. 133. — P. 361—364.
40. Fedkiw R. P., Merriman B., Osher S. Efficient Characteristic ProJection in Upwind Difference Schemes for Hyperbolic Systems (The Complementary Projection Method) // *J. Comput. Phys*. — 1998. — Vol. 141. — P. 22—36.

41. *Harten A., Engquist B., Osher S., Chakravarthy S. R.* Uniformly High Order Accurate Non-Oscillatory Schemes, III // *J. Comput. Phys.* — 1997. — Vol. 131. — P. 3—47.
42. *Marano S., Franceschetti M.* Ray Propagation in a Random Lattice: A Maximum Entropy, Anomalous Diffusion Process // *IEEE Transactions on Antennas and Propagation.* — 2005. — Vol. 53. — № 6. — P. 1888—1896.
43. *Mazzia A., Bergamaschi L., Putti M.* A Time-Splitting Technique for the Advection-Dispersion Equation in Groundwater // *J. Comput. Phys.* — 2000. — Vol. 157. — P. 181—198.
44. *Li Y.* Wavenumber-Extended High Order Upwind-Biased Finite-Difference Schemes for Convective Scalar Transport // *J. Comput. Phys.* — 1997. — Vol. 33. — P. 235—255.
45. *Boris J. P., Book D. L.* Flux-Corrected Transport. I: SHASTA, A Fluid Transport Algorithm That Works // *J. Comput. Phys.* — 1997. — Vol. 135. — P. 172—186.
46. *Toth G.* The LASY Preprocessor and Its Application to General Multidimensional Codes // *J. Comput. Phys.* — 1997. — Vol. 138. — P. 981—990.
47. *Shu C.-W., Osher S.* Efficient Implementation of Essentially Non-oscillatory Shock-Capturing Schemes, II // *J. Comput. Phys.* — 1989. — Vol. 83. — P. 32—78.
48. *Kurganov A., Tadmor E.* New High-Resolution Central Schemes for Nonlinear Conservation Laws for Convection-Diffusion Equations // *J. Comput. Phys.* — 2000. — Vol. 160. — P. 214—282.
49. *Pruess K., Oldenburg C., Moridis G.* TOUGH2 User's Guide, Version 2.0 / Earth Sciences Division, Lawrence Berkeley National Laboratory Univ. of California. — Berkeley, California, November 1999. — 195 p.
50. *Федер Е.* Фракталы. — М.: Мир, 1991.
51. *Broadbent S. R., Hammersley J. M.* Percolation processes. — I: Crystals and mazes // *Proc. Cambridge Philos. Soc.* — 1957. — Vol. 53. — P. 629—641.
52. *Stauffer D.* Introduction to Percolation Theory. — London: Taylor & Francis, 1985.
53. *Aharony A.* Percolation // *Directions in Condensed Matter Physics* / eds. G. Grinstein & G. Mazenko. — Singapore: World Scientific, 1986. — P. 1—50.
54. *Aharony A., Stauffer D.* Percolation // *Encyclopedia of Physical Science and Technology.* — Vol. 10. — [S. l.], 1987. — P. 226—244.
55. *Shante V. K. S., Kirkpatrick S.* An introduction to percolation theory // *Adv. Phys.* — 1971. — Vol. 20. — P. 325—357.
56. *Kirkpatrick S.* Percolation and conduction // *Rev. Mod. Phys.* — 1973. — Vol. 45. — P. 574—588.
57. *Stauffer D.* Scaling theory of percolation clusters // *Phys. Res.* — 1979. — Vol. 54. — P. 1—74.

58. *Essam J. W.* Percolation theory // *Rep. Prog. Phys.* — 1980. — Vol. 43. — P. 833—912.
59. Percolation Structures and Processes / *G. Deutscher, R. Zallen, J. Adler*, eds. // *Ann. Isr. Phys. Soc.* — 1983. — Vol. 5.
60. Scaling Phenomena in Disordered Systems / *R. Pynn, A. Skjeltorp*, eds. — New York: Plenum Press, 1985.
61. Fragmentation Form and Flow in Fractured Media / *J. R. Engelman, Z. Jaeger*, eds. // *Ann. Isr. Phys. Soc.* — 1986. — Vol. 8.
62. Time-Dependent Effects in Disordered Materials / *R. Pynn, T. Riste*, eds. — New York: Plenum Press, 1987.
63. *Киркпатрик С.* Перколяция и проводимость // Теория и свойства неоднородных материалов. — Вып. 7. — М.: Мир, 1977. — С. 240—292.
64. *Головизнин В. М., Самарский А. А.* Разностная аппроксимация конвективного переноса с пространственным расщеплением временной производной // *Мат. моделирование.* — 1998. — Т. 10, № 1. — С. 86—100.
65. *Головизнин В. М., Самарский А. А.* Некоторые свойства разностной схемы «Кабаре» // *Мат. моделирование.* — 1998. — Т. 10, № 1. — С. 101—116.
66. *Головизнин В. М., Карабасов С. А.* Нелинейная коррекция схемы «Кабаре» // *Мат. моделирование.* — 1998. — Т. 12, № 1. — С. 107—123.
67. *Головизнин В. М., Карабасов С. А., Кобринский И. М.* Балансно-характеристические схемы с разделенными консервативными и потоковыми переменными // *Мат. моделирование.* — 2003. — Т. 15, № 9. — С. 29—48.
68. *Головизнин В. М., Карабасов С. А.* Балансно-характеристические схемы на кусочно-постоянных начальных данных: Прыжковый перенос // *Мат. моделирование.* — 2003. — Т. 15, № 10. — С. 71—83.
69. *Головизнин В. М., Карабасов С. А., Тишкина Л. В.* Точные сеточные алгоритмы для численного решения линейных систем одномерных гиперболических уравнений // *Сб. докладов международной научной конференции «Фундаментальные и прикладные вопросы механики»*, 2003. Хабаровск. — Т. 1 — Хабаровск, 2003. — С. 195—201.
70. *Головизнин В. М., Карабасов С. А., Суходулов Д. А.* Вариационный подход к получению разностной схемы с пространственно расщепленной временной производной для уравнения Картвега — де Вриза // *Мат. моделирование.* — 2003. — Т. 12, № 4. — С. 105—116.
71. *Головизнин В. М.* Балансно-характеристический метод численного решения уравнений газовой динамики // *Докл. Акад. наук.* — 2005. — Т. 403, № 4. — С. 1—6.

Глава 3. Обратные задачи по идентификации параметров аномальной диффузии

В последние годы наблюдается повышенный интерес к искусственным нейронным сетям (ИНС), которые нашли применение в самых разных областях — технике, бизнесе, медицине. ИНС используются при решении задач прогнозирования, классификации, управления. Такой впечатляющий успех определяется несколькими причинами [1—4]:

- Искусственные нейронные сети — мощный метод имитации процессов и явлений, позволяющий воспроизводить чрезвычайно сложные зависимости. ИНС по своей природе являются нелинейными, в то время как на протяжении многих лет для построения моделей использовался линейный подход. Кроме того, во многих случаях ИНС позволяют преодолеть «проклятие размерности», обусловленное тем, что моделирование нелинейных явлений в случае большого числа переменных требует огромного количества вычислительных ресурсов.
- ИНС используют механизм обучения. Пользователь нейронной сети подбирает представительные данные, а затем запускает алгоритм обучения, который автоматически настраивает параметры сети. При этом от пользователя, конечно, требуется определенный набор эвристических знаний о том, как следует отбирать и подготавливать данные, выбирать нужную архитектуру сети и интерпретировать результаты, однако уровень знаний, необходимых для успешного применения ИНС, гораздо скромнее, чем при использовании традиционных методов.

Теория ИНС возникла из исследований в области искусственного интеллекта, а именно попыток воспроизвести способность нервных биологических систем обучаться и исправлять ошибки, моделируя низкоуровневую структуру мозга. Основой исследований по искусственному интеллекту в 1960—1980-е годы были экспертные системы. Они основывались на высокоуровневом моделировании процесса мышления (в частности, на представлении, что этот процесс построен на манипуляциях с символами). Скоро стало ясно, что хотя подобные системы могут принести пользу в некоторых областях, они не отражают ключевых свойств человеческого интеллекта. Согласно одной из точек зрения причина этого состоит в том, что они не в состоянии воспроизвести структуру мозга. Чтобы создать искусственный интеллект, необходимо построить систему с архитектурой, похожей на строение мозга.

Искусственные нейронные сети также составлены из множества простых элементов, действующих параллельно. Как и в природе, функция нейронной сети в значительной степени определяется связями между элементами. Нейронную сеть можно обучать для выполнения конкретной функции, регулируя значения коэффициентов (весов) связи. Обычно ИНС настраиваются или обучаются так, чтобы конкретные входы преобразовывались в заданный целевой выход. Сеть настраивается (обучается), основываясь на сравнении сигналов выхода и цели до тех пор, пока выход сети не будет соответствовать цели. Чтобы обучить сеть при таком управляемом обучении, как правило, используется много пар значений сигналов вход/цель.

ИНС обучаются выполнять сложные функции в различных областях приложений, включая распознавание образов, идентификацию, классификацию объектов, распознавание речи, системы технического зрения и системы управления. Они нашли применение во многих областях техники, где используются для решения многочисленных прикладных задач:

- в космонавтике и авиации — для построения систем автоматического пилотирования самолетов, имитации траекторий полета, разработки перспективных конструкций автопилотов, моделирования и обнаружения неисправностей агрегатов летательных аппаратов, управления воздушным движением, обработки аэрокосмической информации;
- в автомобилестроении — для проектирования автоматических систем управления;
- в банковском деле — для автоматического чтения документов и их контроля, оценки эффективности кредитных вложений;
- в электронике — для управления процессом проектирования и размещения микросхем на плате, нелинейного моделирования и анализа отказов микросхем, для построения систем машинного зрения и синтеза речи;
- в робототехнике — для управления роботами, построения контроллеров роботов и манипуляторов и систем технического зрения;
- при передаче данных — для сжатия и отображения данных, распознавания речи, классификации гласных звуков, преобразования текста в речь, для синхронного перевода.

Этот перечень можно продолжить. Широкое применение ИНС, значительные ресурсы, вкладываемые в создание программного обеспечения и аппаратуры для их реализации, показывают, что существует большая заинтересованность в разработке ИНС. Мы будем использовать искусственные нейронные сети для решения обратной задачи по идентификации параметров аномальной диффузии.

3.1. Предпосылки для решения обратной задачи

Как было показано во введении, использование классических представлений о характере дисперсии может приводить к принципиальным ошибкам при анализе безопасности подземных хранилищ радиоактивных отходов. В диффузионных процессах концентрация экспоненциально убывает по мере удаления от источника. С другой стороны, имеются многочисленные экспериментальные данные, свидетельствующие о том, что в сильнонеоднородных средах это условие может нарушаться, и характер убывания концентрации на больших расстояниях от источника становится степенным. При степенном законе убывания радионуклиды с концентрациями, превышающими предельно допустимые, могут просочиться на расстояния, на много порядков превышающие найденные из классических представлений.

Неклассический перенос связан с наличием в геологических формациях разветвленной сети разномасштабных трещин и математически описывается интегро-дифференциальными уравнениями, частным случаем которых являются так называемые уравнения дробной диффузии, записываемые в терминах дробных производных (см. главу 2). Помимо коэффициента дисперсии и скорости конвективного переноса в этих уравнениях как минимум содержатся дополнительные параметры (α, β) , определяющие дробный порядок производных и их анизотропию. Случай $\alpha = 2$ соответствует обычной диффузии. Чем больше эта величина отличается от 2 в сторону 1, тем более жесткие требования нужно предъявлять к расположению мест размещения подземных хранилищ. Теоретического метода определения значений параметров α и β по структуре породы в настоящее время не существует, поэтому чрезвычайно важна обратная задача их нахождения по натурным измерениям динамики концентраций.

Решение прямой и обратной задач для уравнений в дробных производных — сложная математическая проблема. В настоящее время наиболее перспективным направлением представляется использование численных алгоритмов для решения прямой задачи и ИНС для решения обратной задачи. В рамках этого подхода в ИБРАЭ РАН выполнен цикл работ по созданию новой математической и компьютерной технологии для оценки безопасности захоронений радиоактивных отходов, включающий следующие этапы:

- разработку новых эффективных численных методов решения одномерных и многомерных прямых задач неклассической диффузии с дробными дисперсионными потоками, исследование поведения фундаментальных решений этих уравнений;

- разработку методологии использования ИНС для решения обратной задачи дробной диффузии — определения неизвестных параметров оператора дробной диффузии, характеризующих фундаментальные свойства среды захоронения, по данным натуральных измерений, получаемых из трассерных экспериментов.

Обе части работы неразрывно и органично связаны — обучение нейронных сетей осуществляется на основе решения значительного количества прямых задач, оценка безопасности захоронений по найденным характеристикам среды также проводится на основе решения прямой задачи.

3.1.1. Обобщенная постановка обратной задачи

Обобщение постановки обратной задачи по идентификации параметров аномальной диффузии на двумерный случай выглядит следующим образом:

- Задано начальное распределение концентрации $C_0(x, y)$ (рис. 3.1.1) и распределение концентрации $C_1(x, y)$ (рис. 3.1.2) через некоторый интервал времени t_1 . Диффузия постоянна и изотропна, т. е. коэффициенты диффузии D_x и D_y равны. Конвективный перенос отсутствует.
- Необходимо определить параметры аномальной диффузии $\alpha_x, \alpha_y, \beta_x, \beta_y$.

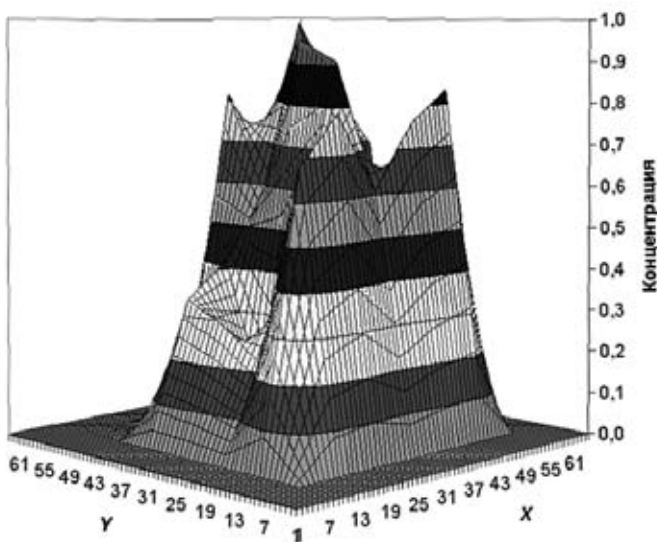


Рис. 3.1.1. Начальное распределение концентрации

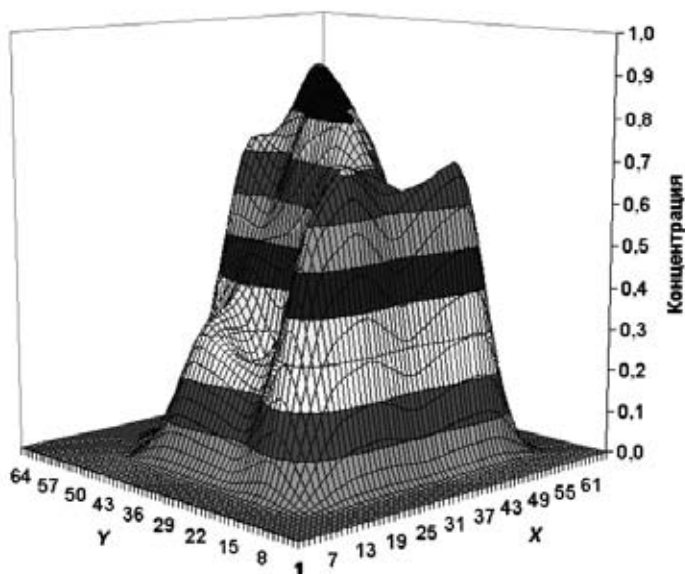


Рис. 3.1.2. Распределение концентрации через некоторый интервал времени

3.1.2. Подходы к решению обратной задачи

В качестве инструментария можно использовать технологию ИНС или, например, метод перебора. Перечислим преимущества и недостатки этих методов и выделим наиболее подходящий.

Рассмотрим модель дробной диффузии в одномерном случае. Как известно, такая модель описывается уравнением

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + (1+\beta) \frac{D}{2} \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} + (1-\beta) \frac{D}{2} \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha}, \quad (3.1.1)$$

где v — скорость конвективного переноса примеси.

Введение замены $t^* = tD$ в уравнении (3.1.1) приводит к уравнению

$$\frac{\partial C}{\partial t^*} = (1+\beta) \frac{1}{2} \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} + (1-\beta) \frac{1}{2} \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha}, \quad (3.1.2)$$

которое уже не содержит неизвестного коэффициента диффузии D , что сильно облегчает задачу. Но в уравнении (3.1.2) t^* — не время, а некий параметр. Поэтому в качестве интервала времени между профилями

$C_0(x, y)$ и $C_1(x, y)$ уже невозможно использовать время t_1 . В настоящей работе предлагается вместо него использовать следующий безразмерный параметр

$$\delta = 1 - \frac{\sum_{X_1 < X_i < X_2} C_1^i}{\sum_{X_1 < X_i < X_2} C_0^i}, \quad (3.1.3)$$

который представляет собой относительное изменение суммарной концентрации внутри некоторой области (ограниченной точками X_1 и X_2). Существенно, что эта область находится внутри носителя концентрации.

Метод перебора. Один из самых простых способов решения обратных задач — метод перебора. Покроем ось x расчетной сеткой. Решим уравнение дробной диффузии (3.1.1) при начальной функции $C_0(x)$ и параметре δ , определенном по формуле (3.1.3) для различных параметров α (перебираются все значения от 1 до 2 с определенным шагом) и β (перебираются все значения от -1 до 1 с определенным шагом). Для каждого решения вычислим невязку по отношению к распределению $C_0(x)$. Параметры α и β , соответствующие минимальной невязке, являются искомыми.

Следует заметить, что этот метод достаточно ресурсоемок. Чтобы определить параметры дробной диффузии с точностью до $N\%$, необходимо решить уравнение дробной диффузии $(50/N)^2$ раз в одномерном случае, $(50/N)^4$ раз в двумерном случае и $(50/N)^6$ раз в трехмерном случае. Например, чтобы определить параметры дробной диффузии с точностью до 1% в одномерном случае методом перебора, необходимо сделать 2500 расчетов, а в двумерном и трехмерном случаях решение задачи займет не один день. Таким образом, на простом примере (модели дробной диффузии в одномерном случае) мы показали, что метод перебора оказывается неудобным.

ИНС. Рассмотрим поверхность невязок. На рис. 3.1.3—3.1.6 приведены поверхности при разных параметрах дробной диффузии для начального профиля концентрации, представленного на рис. 3.1.7.

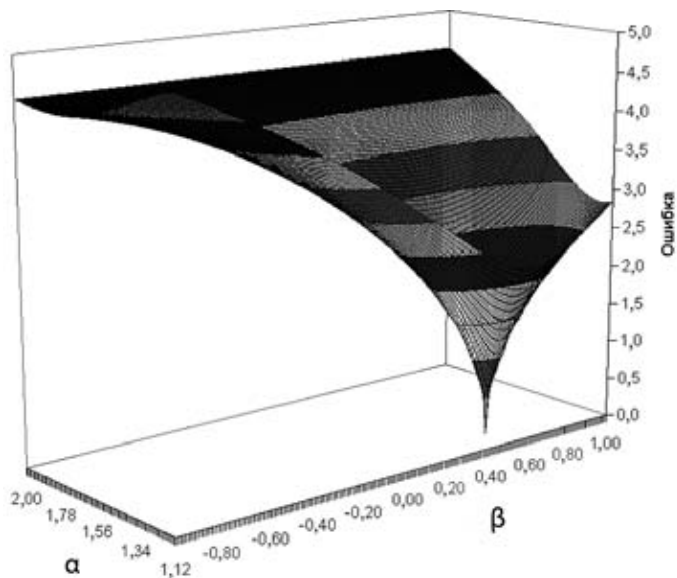


Рис. 3.1.3. Поверхность ошибок по норме L_2 для $\alpha = 1,25$ и $\beta = 0,5$

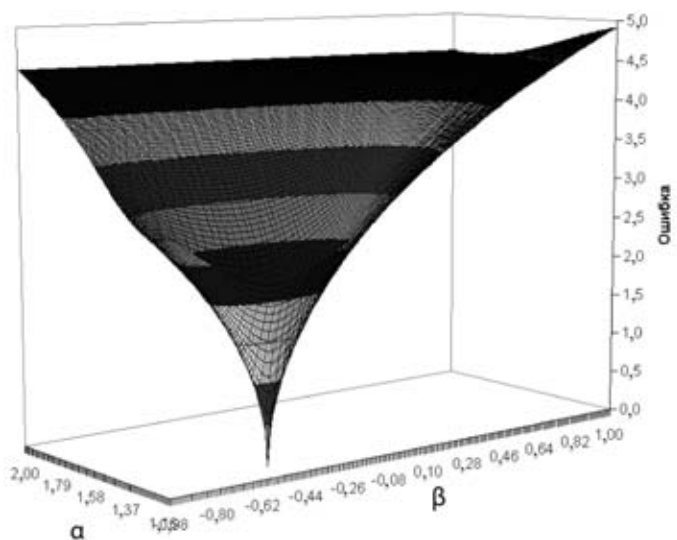


Рис. 3.1.4. Поверхность ошибок по норме L_2 для $\alpha = 1,25$ и $\beta = -0,5$

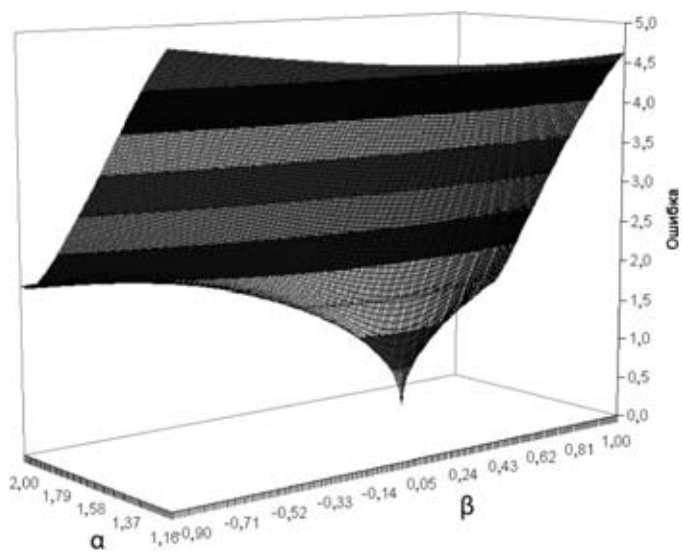


Рис. 3.1.5. Поверхность ошибок по норме L2 для $\alpha = 1,75$ и $\beta = 0,5$

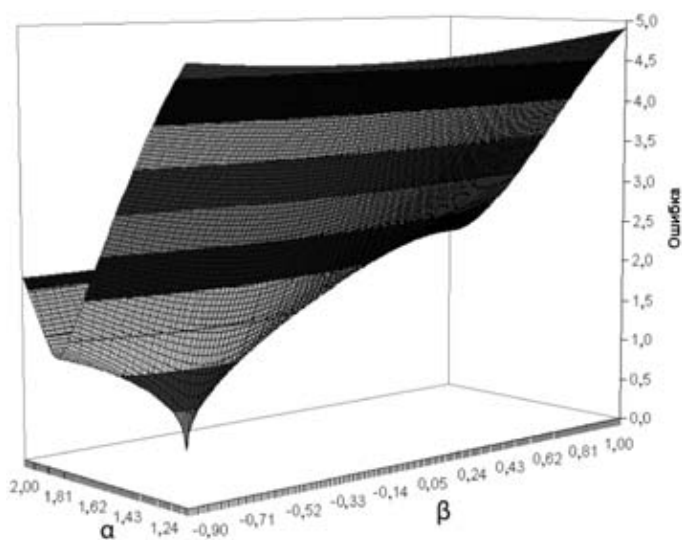


Рис. 3.1.6. Поверхность ошибок по норме L2 для $\alpha = 1,75$ и $\beta = -0,5$

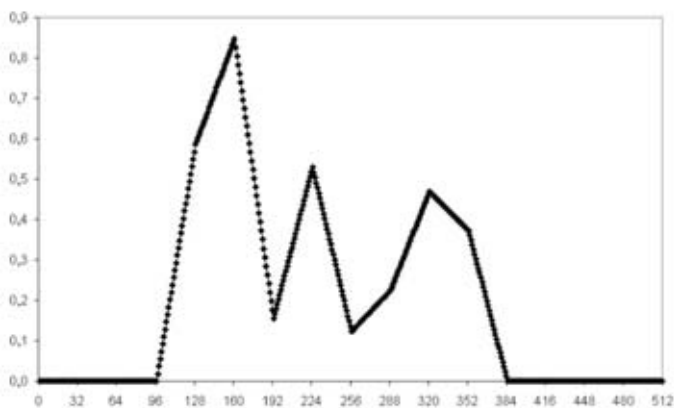


Рис. 3.1.7. Начальный профиль концентрации

Из графиков видно, что поверхность не имеет локальных минимумов, а это значит, что можно использовать менее ресурсоемкие алгоритмы градиентного спуска при решении обратной задачи. Удобным средством реализации этих алгоритмов является технология искусственных нейронных сетей.

3.2. Искусственные нейронные сети

3.2.1. Основные понятия

Широкий круг задач, решаемый ИНС, не позволяет в настоящее время создавать универсальные, мощные сети, вынуждая разрабатывать специализированные ИНС, функционирующие по различным алгоритмам.

Основу каждой ИНС составляют относительно простые, в большинстве случаев однотипные, элементы (ячейки), имитирующие работу нейронов мозга. Далее под нейроном будет подразумеваться искусственный нейрон, т. е. ячейка ИНС. Каждый нейрон характеризуется своим текущим состоянием по аналогии с нервными клетками головного мозга, которые могут быть возбуждены или заторможены. Он обладает группой синапсов — однонаправленных входных связей, соединенных с выходами других нейронов, а также имеет аксон — выходную связь, с которой сигнал (возбуждения или торможения) поступает на синапсы следующих нейронов. Структура нейрона с единственным скалярным входом показана на рис. 3.2.1а.

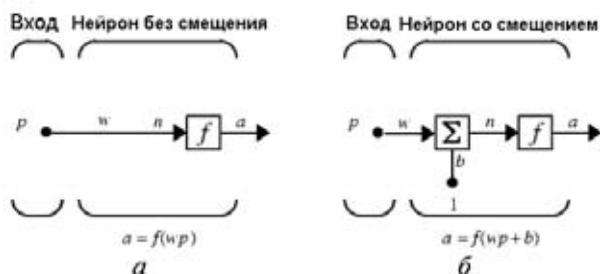


Рис. 3.2.1. Модель нейрона без смещения (а) и со смещением (б)

Скалярный входной сигнал p умножается на скалярный весовой коэффициент w , и результирующий взвешенный вход wp является аргументом функции активации нейрона f , которая порождает скалярный выход a .

Нейрон, показанный на рис. 3.2.1б, дополнен скалярным смещением b (в литературе встречается термин «порог нейронного элемента»). Смещение (порог) суммируется со взвешенным входом wp и приводит к сдвигу аргумента функции f на величину b . Действие смещения можно свести к схеме взвешивания, если представить, что нейрон имеет второй входной сигнал со значением, равным 1. Вход n функции активации нейрона по-прежнему остается скалярным и равным сумме взвешенного входа и смещения b ($n = wp + b$). Эта сумма является аргументом функции активации f , выходом функции активации служит сигнал a . Константы w и b — скалярные параметры нейрона. Основной принцип работы нейронной сети состоит в настройке параметров нейрона таким образом, чтобы поведение сети соответствовало некоторому желаемому поведению. Регулируя веса или параметры смещения, можно обучить сеть выполнять конкретную работу; возможно также, что сеть сама будет корректировать свои параметры, чтобы достичь требуемого результата.

Уравнение нейрона со смещением имеет вид

$$a = f(wp + b). \quad (3.2.1)$$

Как уже отмечалось, смещение b — настраиваемый скалярный параметр нейрона, который не является входом, а константа 1, которая управляет смещением, рассматривается как вход и может быть учтена в виде линейной комбинации векторов входа:

$$a = (wb) \begin{pmatrix} p \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (3.2.2)$$

Функции активации нейрона могут иметь самый различный вид. Функции активации f , как правило, принадлежат к классу сигмоидальных функций¹ с аргументом n и выходом a .

Рассмотрим три наиболее распространенные формы функции активации.

Единичная функция активации с жестким ограничением hardlim. Эта функция описывается соотношением

$$a = \begin{cases} 0, & \text{если } n < 0, \\ 1, & \text{если } n \geq 0. \end{cases}$$

Линейная функция активации purelin. Эта функция изображена на **рис. 3.2.2а**.

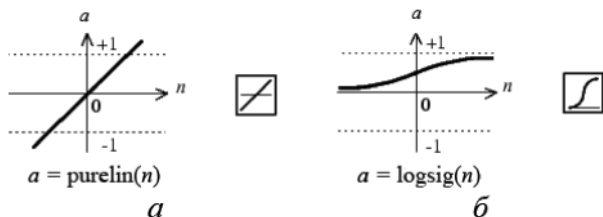


Рис. 3.2.2. Функции активации: линейная (а) и логистическая (б)

Логистическая функция активации logsig (сигмоид). Эта функция описывается соотношением

$$a(n) = \frac{1}{1 + e^{-\lambda n}} \quad (3.2.3)$$

и показана на **рис. 3.2.2б**. При уменьшении λ сигмоид становится более пологим, в пределе при $\lambda = 0$ вырождаясь в горизонтальную линию на уровне 0,5, при увеличении λ сигмоид приближается по внешнему виду к функции единичного скачка *hardlim*. Говоря о логистической функции активации, будем подразумевать $\lambda = 1$. Логистическая функция принадлежит к классу сигмоидальных функций, и ее аргумент может принимать любое

¹ Сигмоидальной (S-образной) функцией называется непрерывная функция, имеющая две горизонтальные асимптоты и одну точку перегиба.

значение от $-\infty$ до $+\infty$, а выход изменяется в диапазоне от 0 до 1. Одно из ценных свойств логистической функции — простое выражение для ее производной, применение которого будет рассмотрено в алгоритме обратного распространения ошибки.

$$f'(x) = \lambda f(x)[1 - f(x)]. \quad (3.2.4)$$

Символы в квадратах справа от графиков характеризуют функцию активации. Это изображение будем использовать на структурных схемах нейронных сетей.

Нейрон с одним вектором входа p с R элементами p_1, p_2, \dots, p_R показан на **рис. 3.2.3**. Здесь каждый элемент входа умножается на веса $w_{11}, w_{12}, \dots, w_{1R}$ соответственно, и взвешенные значения передаются на сумматор. Их сумма равна скалярному произведению вектора — строки W на вектор входа p . Нейрон имеет смещение b , которое суммируется со взвешенной суммой входов. Результирующая сумма

$$n = w_{11}p_1 + w_{12}p_2 + \dots + w_{1R}p_R + b \quad (3.2.5)$$

и служит аргументом функции активации f . В векторной записи это выглядит так:

$$n = Wp + b. \quad (3.2.6)$$

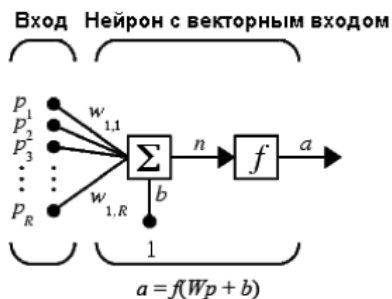


Рис. 3.2.3. Схематический вид нейрона с векторным входом

Схема, приведенная на **рис. 3.2.3**, называется слоем сети. Слой характеризуется матрицей весов W , смещением b , операциями умножения Wp , суммирования и функцией активации f . Вектор входов p обычно не включается в характеристики слоя.

3.2.2. Классификация ИНС

Реальная ИНС может содержать один или больше слоев и соответственно характеризоваться как однослойная или многослойная.

Развернутая схема сети из одного слоя с R входными элементами и S нейронами показана на рис. 3.2.4.

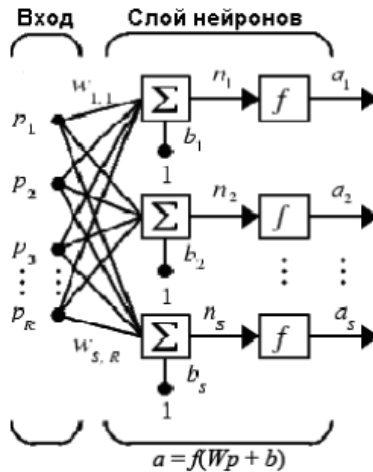


Рис. 3.2.4. Схематический вид слоя нейронов с векторным входом

В данной сети каждый элемент вектора входа соединен со всеми входами нейрона, и это соединение задается матрицей весов W ; при этом каждый i -й нейрон включает суммирующий элемент, который формирует скалярный выход $n(i)$. Совокупность скалярных функций $n(i)$ объединяется в S -элементный вектор входа n функции активации слоя. Выходы слоя нейронов формируют вектор — столбец a , и, таким образом, описание слоя нейронов имеет вид

$$a = f(Wp + b). \quad (3.2.7)$$

Количество входов R в слое может не совпадать с количеством нейронов S . В каждом слое, как правило, используется одна и та же функция активации. Однако можно создавать составные слои нейронов с использованием различных функций активации, соединяя сети, подобные изображенной на рис. 3.2.4, параллельно. Обе сети будут иметь те же самые входы, и каждая сеть будет генерировать определенную часть выходов. Элементы вектора входа передаются в сеть через матрицу весов W , имеющую вид

$$W = \begin{bmatrix} w_{11} & w_{12} & \dots & w_{1R} \\ w_{21} & w_{22} & \dots & w_{2R} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ w_{S1} & w_{S2} & \dots & w_{SR} \end{bmatrix}. \quad (3.2.8)$$

Заметим, что индексы строк матрицы W указывают адресатов (пункты назначения) весов нейронов, а индексы столбцов — какой источник является входом для этого веса. Таким образом, элемент матрицы весов $w_{12} = W(1,2)$ определяет коэффициент, на который умножается второй элемент входа при передаче его на первый нейрон.

Рассмотрим сети, имеющие несколько слоев. Будем называть весовые матрицы, соединенные с входами, весами входа слоя, а весовые матрицы для сигналов, исходящие из слоя, — весами выхода слоя. Будем использовать верхние индексы, чтобы указать источник и адресат для различных весов и других элементов ИНС. Для матриц весов входа и выхода слоя будут использованы обозначения IW (input weight) и LW (layer weight) соответственно.

Тогда, например, IW^{11} — весовая матрица, связанная с входами, ее верхние индексы указывают, что источником входов является первый слой (второй индекс) и адресатом является также первый слой (первый индекс). Элементы этого слоя, такие как смещение b^1 , вход функции активации n^1 и выход слоя a^1 , имеют верхние индексы 1, чтобы обозначить, что они связаны с первым слоем. Когда сеть состоит из нескольких слоев, у каждого слоя есть своя матрица весов W , вектор смещения b и вектор выхода a . Использование этой системы обозначений для сети из трех слоев можно видеть на структурной схеме, приведенной в нижней части **рис. 3.2.5**.

Эта сеть имеет R входов, S^1 нейронов в первом слое, S^2 нейронов во втором слое и т. д. Для общности будем считать, что различные слои имеют разное число нейронов. На смещения для каждого нейрона подан постоянный входной сигнал 1. Заметим, что выходы каждого промежуточного слоя служат входами для следующего слоя. Слои многослойной сети имеют различные назначения. Слой, который образует выход сети, называется слоем выхода. Все другие слои называются скрытыми слоями. Трехслойная сеть, показанная на **рис. 3.2.5**, имеет выходной слой (слой 3) и два скрытых слоя (слой 1 и слой 2).

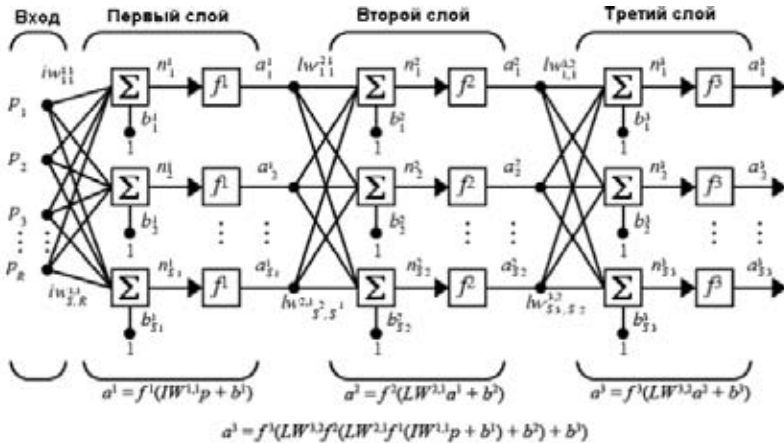


Рис. 3.2.5. Схематический вид трехслойной нейронной сети

Многослойные сети обладают весьма мощными возможностями. Например, двухслойная сеть, в которой первый слой содержит сигмоидальную, а второй — линейную функцию активации, может быть обучена аппроксимировать с произвольной точностью любую функцию с конечным числом точек разрыва.

В заключение можно сформулировать следующие выводы. Вход функции активации нейрона определяется смещением и суммой взвешенных входов. Выход нейрона зависит как от входов нейрона, так и от вида функции активации. Один нейрон не может решать сложные задачи, однако несколько нейронов, объединенных в один или несколько слоев, обладают большими возможностями.

Архитектура сети состоит из описания того, сколько слоев имеет сеть, количества нейронов в каждом слое, вида функции активации каждого слоя и информации о соединении слоев. Архитектура сети зависит от той задачи, которую она должна решать.

Работа сети состоит в вычислении выходов сети на основе известных входов с целью формирования желаемого отображения вход/выход. Конкретная задача определяет число входов и число выходов сети. Кроме числа нейронов в выходном слое сети для проектировщика важно число нейронов в каждом слое. Большее количество нейронов в скрытых слоях обеспечивает большую мощность сети. Если должно быть реализовано линейное отображение, то следует использовать нейроны с линейными функциями активации. При этом надо помнить, что линейные нейронные сети не могут формировать нелинейные отображения. Использование нелинейных функций активации позволяет настроить нейронную сеть на реализацию нелинейных связей между входом и выходом.

Сети со смещением позволяют формировать более сложные связи между входами и выходами, чем сети без смещений. Например, нейрон без смещения, когда все входы нулевые, будет всегда задавать вход функции активации равным нулю, однако нейрон со смещением может быть обучен так, чтобы при тех же условиях задать вход функции активации произвольной формы.

В многослойных сетях часто применяются нелинейные сигмоидальные функции активации типа логистической (см. **рис. 3.2.2б**). Если последний слой многослойной сети использует такие функции активации, то выходы сети будут ограничены (как уже отмечалось, от 0 до 1). Когда в выходном слое используются линейные нейроны, выходы сети могут принимать произвольные значения.

В литературе встречаются интересная разновидность многослойных сетей — так называемые нейронные сети с перекрестными связями. Это такие сети, у которых каждый нейрон каждого слоя соединен с каждым нейроном любого другого слоя. Если в нейронной сети этого типа оставить по одному нейрону в каждом слое, то она будет обладать следующей особенностью: из всех нейронных сетей у нее при фиксированном количестве связей будет наибольшее количество слоев. Поэтому можно предположить, что такие сети наиболее мощные.

3.2.3. Алгоритмы обучения нейронных сетей

После того как определено количество слоев сети и число нейронов в каждом из них, нужно назначить значения весов и смещений, которые минимизируют ошибку решения. Это достигается с помощью процедур обучения. Путем анализа имеющихся в распоряжении аналитика входных и выходных данных веса и смещения сети автоматически настраиваются так, чтобы минимизировать разность между желаемым и полученным на выходе в результате моделирования сигналами. Эта разность носит название ошибки обучения. Таким образом, процесс обучения — это подгонка параметров той модели процесса или явления, которая реализуется нейронной сетью. Ошибка обучения для конкретной конфигурации нейронной сети определяется путем прогона через сеть всех имеющихся наблюдений и сравнения выходных значений с желаемыми (целевыми) значениями. Эти разности позволяют сформировать так называемую функцию ошибок. В качестве такой функции чаще всего используется сумма квадратов ошибок. При моделировании нейронных сетей с линейными функциями активации нейронов можно построить алгоритм, гарантирующий достижение абсолютного минимума ошибки обучения. Для нейронных сетей с нелинейными функциями активации в общем случае нельзя гарантировать достижение глобального минимума функции ошибки.

При таком подходе к процедуре обучения может оказаться полезным геометрический анализ поверхности функции ошибок. Определим веса и смещения как свободные параметры модели и их общее число обозначим через N ; каждому набору таких параметров поставим в соответствие одно измерение в виде ошибки сети. Тогда для всевозможных сочетаний весов и смещений соответствующую ошибку сети можно изобразить точкой в $(N + 1)$ -мерном пространстве, а все такие точки образуют некоторую поверхность, называемую поверхностью функции ошибок. При таком подходе цель обучения нейронной сети состоит в том, чтобы найти на этой многомерной поверхности глобальный минимум.

В случае линейной модели сети и функции ошибок в виде суммы квадратов такая поверхность будет представлять собой параболоид, который имеет единственный минимум, что позволяет отыскать этот минимум достаточно просто.

В случае нелинейной модели поверхность ошибок имеет гораздо более сложное строение и обладает рядом неблагоприятных свойств, в частности может иметь локальные минимумы, плоские участки, седловые точки и длинные узкие «овраги».

Определить глобальный минимум многомерной функции аналитически невозможно, поэтому обучение нейронной сети по сути дела является процедурой изучения поверхности функции ошибок. Отталкиваясь от случайно выбранной точки на поверхности функции ошибок, алгоритм обучения постепенно отыскивает глобальный минимум. Как правило, для этого вычисляется градиент (наклон) функции ошибок в данной точке, а затем эта информация используется для продвижения вниз по склону. В конце концов алгоритм останавливается в некотором минимуме, который может оказаться лишь локальным, а если повезет — то и глобальным.

Таким образом, алгоритмы обучения нейронных сетей аналогичны алгоритмам поиска глобального экстремума функции многих переменных. С учетом специфики нейронных сетей для них разработаны специальные алгоритмы обучения, среди которых следует выделить алгоритм обратного распространения ошибки [5—6].

При использовании этого алгоритма сеть рассчитывает возникающую в выходном слое ошибку и вычисляет вектор градиента как функцию весов и смещений. Он указывает направление кратчайшего спуска по поверхности для данной точки, поэтому, если продвинуться в этом направлении, ошибка уменьшится. Последовательность таких шагов в конце концов приведет к минимуму того или иного типа.

Определенную трудность здесь вызывает выбор величины шага. При большой длине шага сходимость будет более быстрой, но имеется опасность перепрыгнуть через решение или уйти в неправильном направлении. Классическим примером такого явления при обучении нейронной сети является ситуация, когда алгоритм очень медленно продвигается по узкому «оврагу» с крутыми склонами, перепрыгивая с одного склона на другой. Напротив, при малом шаге, вероятно, будет выбрано верное направление, однако при этом потребуются очень много итераций. На практике величина шага выбирается пропорциональной крутизне склона (градиенту функции ошибок); такой коэффициент пропорциональности называется параметром скорости настройки. Его правильный выбор зависит от конкретной задачи и обычно осуществляется опытным путем; этот параметр может также зависеть от времени, уменьшаясь по мере выполнения алгоритма.

Алгоритм действует итеративно, и его шаги принято называть эпохами или циклами. На каждом цикле на вход сети последовательно подаются все обучающие примеры, выходные значения сравниваются с целевыми значениями и вычисляется функция ошибки. Значения функции ошибки, а также ее градиента используются для корректировки весов и смещений, после чего все действия повторяются. Начальные значения весов и смещений сети выбираются случайным образом, и процесс обучения прекращается либо когда реализовано определенное количество циклов, либо когда ошибка достигнет некоторого малого значения или перестанет уменьшаться.

Явление переобучения. Обратимся к задаче аппроксимации некоторой функции многочленом. Графики многочленов часто имеют весьма замысловатую форму, и чем выше степень многочлена, тем их форма сложнее. Если имеется некоторый набор данных, можно поставить цель подобрать для него аппроксимирующий многочлен и таким образом получить подходящую математическую модель. Поскольку исходные данные, как правило, заданы с погрешностями, нельзя считать, что лучшая модель задается кривой, которая проходит точно через заданные точки. Многочлен низкого порядка может оказаться достаточно грубым для аппроксимации данных, в то время как многочлен высокого порядка может точно следовать данным, принимая при этом замысловатую форму, не имеющую никакого отношения к истинной зависимости. Последняя ситуация и демонстрирует то, что называется явлением переобучения.

При работе с нейронными сетями пользователь сталкивается с той же проблемой. Сети с большим количеством весов позволяют воспроизводить очень сложные функции и в этом смысле склонны к переобучению. Сеть же с небольшим количеством весов может оказаться недостаточно гибкой, чтобы смоделировать имеющуюся зависимость. Например, однослойная

линейная сеть способна воспроизводить только линейные функции. Если использовать многослойные линейные сети, ошибка всегда будет меньше, но это может свидетельствовать не о хорошем качестве модели, а о том, что обнаруживается явление переобучения.

Чтобы выявить эффект переобучения, используется механизм контрольной проверки. Часть обучающих примеров резервируется как контрольная и не используется при обучении сети. В ходе работы алгоритма эти примеры применяются для независимого контроля результата. Вначале ошибка сети на обучающем и контрольном множествах будет одинаковой; если они существенно отличаются, то, вероятно, это означает, что разбиение примеров на два множества не обеспечило их однородность. По мере обучения сети ошибка убывает, и пока обучение уменьшает функцию ошибок, ошибка на контрольном множестве также будет убывать (**рис. 3.2.6а**): обе ошибки сети еще не вышли на горизонтальное плато и не разошлись слишком сильно. Это значит, что можно продолжить обучение — довести количество эпох, например, до 300.

Если же контрольная ошибка перестала убывать или начала расти, это указывает на то, что сеть слишком близко следует исходным данным и обучение нужно остановить. В этом случае нужно уменьшить количество нейронов или слоев, ибо сеть является слишком мощной для решения данной задачи. Если же, наоборот, сеть имеет недостаточную мощность, чтобы воспроизвести имеющуюся зависимость, то явление переобучения скорее всего наблюдаться не будет и обе ошибки — обучения и проверки — не достигнут достаточно малого уровня (**рис. 3.2.6б**).

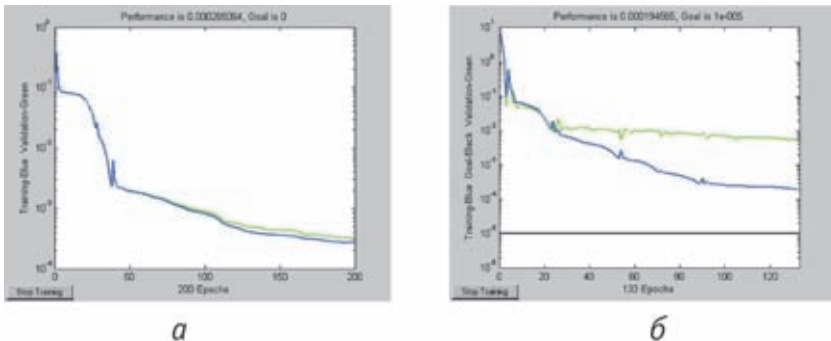


Рис. 3.2.6. Графики ошибок обучения (ось ординат — ошибка обучения, ось абсцисс — номер эпохи). Ошибка сети на обучающем множестве показана синим цветом, на контрольном множестве — зеленым

Алгоритм обратного распространения ошибки. Как только начальные веса и смещения нейронов установлены пользователем или с помощью датчика случайных чисел, сеть готова к процедуре обучения. Процесс обучения требует набора примеров ее желаемого поведения — входов p и желаемых (целевых) выходов t ; во время этого процесса веса и смещения настраиваются так, чтобы минимизировать некоторый функционал ошибки E . По умолчанию в качестве такого функционала принимается среднеквадратичная ошибка между векторами выхода a и t :

$$E = \frac{1}{2} \sum_{q=1}^Q \sum_i (t_i^q - a_i^q)^2, \quad (3.2.9)$$

где Q — размерность обучающей выборки; t_i^q — желаемое (целевое) выходное значение i -го нейрона выборки с номером q ; a_i^q — выходное значение i -го нейрона выборки с номером q .

Рассмотрим нейронную сеть, состоящую из четырех слоев (рис. 3.2.7). Такой случай не сильно отличается в выкладках от общего случая произвольной сети, зато он понятнее и нагляднее. Обозначим слои нейронных элементов от входа к выходу соответственно через l, k, j, i .

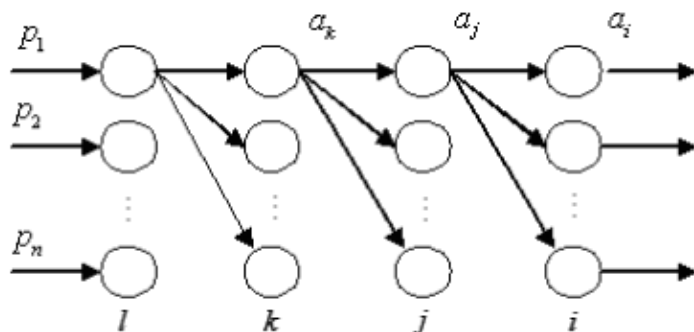


Рис. 3.2.7. Четырехслойная нейронная сеть

Тогда выходное значение i -го нейрона последнего слоя

$$a_i = f(n_i), \quad (3.2.10)$$

$$n_i = \sum_j w_{ij} a_j + b_i, \quad (3.2.11)$$

где n_i — взвешенная сумма i -го нейрона выходного слоя; a_j — выходное значение j -го нейрона предпоследнего слоя; w_{ij} и b_i — соответственно весовой коэффициент и смещение i -го нейрона выходного слоя.

Аналогичным образом выходное значение j -го нейрона предпоследнего слоя

$$a_j = f(n_j), \quad (3.2.12)$$

$$n_j = \sum_k w_{jk} a_k + b_j. \quad (3.2.13)$$

Соответственно для k -го слоя

$$a_k = f(n_k), \quad (3.2.14)$$

$$n_k = \sum_l w_{kl} a_l + b_k. \quad (3.2.15)$$

Как уже отмечалось, алгоритм обратного распространения ошибки минимизирует среднеквадратичную ошибку нейронной сети. Для этого с целью настройки связей используется метод градиентного спуска в пространстве весовых коэффициентов и смещений нейронной сети, согласно которому изменение весовых коэффициентов и порогов сети происходит по следующему правилу:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) - \alpha \frac{\partial E}{\partial w_{ij}(t)}, \quad (3.2.16)$$

$$b_i(t+1) = b_i(t) - \alpha \frac{\partial E}{\partial b_i(t)}, \quad (3.2.17)$$

где E — среднеквадратичная ошибка нейронной сети для одного образа (без суммы по q в (3.2.9)).

Теорема 1. Для любого скрытого слоя j ошибка j -го нейронного элемента определяется рекурсивным образом через ошибки нейронов следующего слоя i :

$$(t_j - a_j) = \sum_{i=1}^m (t_i - a_i) f'(n_i) w_{ij}, \quad (3.2.18)$$

где m — число нейронов следующего слоя по отношению к слою j ; w_{ij} — весовой коэффициент между i -м и j -м нейронами различных слоев; n_i — взвешенная сумма i -го нейрона.

Доказательство. Ошибка j -го нейронного элемента

$$t_j - a_j = -\frac{\partial E}{\partial a_j}. \quad (3.2.19)$$

Ошибка $(t_j - a_j)$ зависит от ошибки нейронных элементов следующего слоя i и определяется по формуле

$$t_j - a_j = -\frac{\partial E}{\partial a_j} = -\sum_i \frac{\partial E}{\partial a_i} \frac{\partial a_i}{\partial n_i} \frac{\partial n_i}{\partial a_j}. \quad (3.2.20)$$

Так как

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial a_i} &= \frac{\partial \left(\frac{1}{2} \sum_i (t_i - a_i)^2 \right)}{\partial a_i} = -(t_i - a_i), \\ \frac{\partial a_i}{\partial n_i} &= \frac{\partial f(n_i)}{\partial n_i} = f'(n_i), \\ \frac{\partial n_i}{\partial a_j} &= \frac{\partial \left(\sum_j w_{ij} a_j + b_i \right)}{\partial a_j} = w_{ij}, \end{aligned}$$

то $(t_j - a_j) = \sum_{i=1}^m (t_i - a_i) f'(n_i) w_{ij}$, что и требовалось доказать.

Используя результаты этой теоремы, можно определить ошибки нейронов скрытого слоя через ошибки следующего слоя по отношению к скрытому слою. Это означает, что если мы знаем ошибку выходного слоя (а это так и происходит при обучении), то мы знаем ошибки всех скрытых слоев.

Теорема 2. Производные среднеквадратичной ошибки по весовым коэффициентам и смещениям нейронных элементов для любых двух слоев i и j многослойной сети определяются следующим образом:

$$\frac{\partial E}{\partial w_{ij}} = -(t_i - a_i) f'(n_i) a_j, \quad (3.2.21)$$

$$\frac{\partial E}{\partial b_i} = -(t_i - a_i) f'(n_i). \quad (3.2.22)$$

Доказательство. Определим производные среднеквадратичной ошибки для различных слоев нейронной сети (см. **рис. 3.2.7**). Тогда для выходного слоя

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_{ij}} &= \frac{\partial E}{\partial a_i} \frac{\partial a_i}{\partial n_i} \frac{\partial n_i}{\partial w_{ij}} = \frac{\partial \left(\frac{1}{2} \sum_i (t_i - a_i)^2 \right)}{\partial a_i} \frac{\partial f(n_i)}{\partial n_i} \frac{\partial \left(\sum_j w_{ij} a_j + b_i \right)}{\partial w_{ij}} = \\ &= -(t_i - a_i) f'(n_i) a_j, \\ \frac{\partial E}{\partial b_i} &= \frac{\partial E}{\partial a_i} \frac{\partial a_i}{\partial n_i} \frac{\partial n_i}{\partial b_i} = \frac{\partial \left(\frac{1}{2} \sum_i (t_i - a_i)^2 \right)}{\partial a_i} \frac{\partial f(n_i)}{\partial n_i} \frac{\partial \left(\sum_j w_{ij} a_j + b_i \right)}{\partial b_i} = \\ &= -(t_i - a_i) f'(n_i). \end{aligned}$$

Таким образом, для выходного слоя теорема доказана. Рассмотрим теперь скрытый слой. Для него производные среднеквадратичной ошибки по весовым коэффициентам и смещениям определяются следующим образом:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E}{\partial w_{jk}} &= \frac{\partial E}{\partial a_j} \frac{\partial a_j}{\partial n_j} \frac{\partial n_j}{\partial w_{jk}} = -(t_j - a_j) \frac{\partial a_j}{\partial n_j} \frac{\partial n_j}{\partial w_{jk}} = (\text{по теореме 1}) = \\ &= -\sum_i (t_i - a_i) f'(n_i) w_{ij} \frac{\partial f(n_j)}{\partial n_j} \frac{\partial \left(\sum_k w_{jk} a_k + b_j \right)}{\partial w_{jk}} = -(t_j - a_j) f'(n_j) a_k, \\ \frac{\partial E}{\partial b_j} &= \frac{\partial E}{\partial a_j} \frac{\partial a_j}{\partial n_j} \frac{\partial n_j}{\partial b_j} = -(t_j - a_j) \frac{\partial a_j}{\partial n_j} \frac{\partial n_j}{\partial b_j} = (\text{по теореме 1}) = \\ &= -\sum_i (t_i - a_i) f'(n_i) w_{ij} \frac{\partial f(n_j)}{\partial n_j} \frac{\partial \left(\sum_k w_{jk} a_k + b_j \right)}{\partial b_j} = -(t_j - a_j) f'(n_j), \end{aligned}$$

что и требовалось доказать.

Следствие 1. Для минимизации среднеквадратичной ошибки сети весовые коэффициенты и смещения нейронных элементов должны изменяться с течением времени следующим образом:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha(t_i - a_i)f'(n_i)a_j, \quad (3.2.23)$$

$$b_i(t+1) = b_i(t) + \alpha(t_i - a_i)f'(n_i), \quad (3.2.24)$$

где α — параметр скорости настройки, о котором речь уже шла выше; t — номер итерации.

Данное следствие определяет правило обучения многослойных нейронных сетей в общем виде, оно называется обобщенным дельта-правилом. Заметим, что в формулы (3.2.23) и (3.2.24) входит производная функции активации. Именно здесь и играет свою роль то ценное свойство логистической функции, о котором уже говорилось. С учетом (3.2.4) обобщенное дельта-правило для логистической функции активации можно представить в виде:

$$w_{ij}(t+1) = w_{ij}(t) + \alpha(t_i - a_i)a_i(1 - a_i)a_j, \quad (3.2.25)$$

$$b_i(t+1) = b_i(t) + \alpha(t_i - a_i)a_i(1 - a_i). \quad (3.2.26)$$

Алгоритм обратного распространения ошибки является эффективным средством обучения нейронных сетей и представляет собой следующую последовательность шагов.

1. Задаются шаг обучения (параметр скорости настройки) α ($0 < \alpha < 1$) и желаемая среднеквадратичная ошибка нейронной сети E_m .

- Инициализируются случайным образом весовые коэффициенты и смещения нейронной сети.
- Подаются последовательно образы из обучающей выборки на вход нейронной сети. При этом для каждого входного образа выполняются следующие действия.

2. Определяется фаза прямого распространения входного образа по нейронной сети. При этом вычисляется выходная активность всех нейронных

элементов сети $a_i = F\left(\sum_j w_{ij}a_j + b_i\right)$, где индекс i характеризует нейроны следующего слоя по отношению к слою j .

3. Осуществляется фаза обратного распространения сигнала, в результате которой определяется ошибка $(t_i - a_i)$, $i = 1, 2, \dots$ нейронных элементов для всех слоев сети. При этом соответственно для выходного и скрытого слоев $(t_i - a_i) = \sum_j (t_j - a_j)f'(n_j)w_{ji}$. В последнем выражении индекс j характеризует нейронные элементы следующего слоя по отношению к слою i .

4. Происходит изменение весовых коэффициентов и смещений нейронных элементов для каждого слоя сети по формулам (3.2.23) и (3.2.24), а если функция активации нейронных элементов логистическая, — по формулам (3.2.25) и (3.2.26).

- Вычисляется суммарная среднеквадратичная ошибка нейронной сети (3.2.9) с учетом размерности выборки.
- Если $E > E_m$, то происходит переход к шагу 3 алгоритма. В противном случае алгоритм обратного распространения ошибки заканчивается.

Таким образом, алгоритм функционирует до тех пор, пока суммарная среднеквадратичная ошибка сети не станет меньше заданной, т. е. $E \leq E_m$.

Недостатки алгоритма обратного распространения ошибки. Алгоритм обратного распространения ошибки, в основе которого лежит градиентный метод, создает ряд проблем при обучении многослойных нейронных сетей. К ним можно отнести:

- медленную сходимости градиентного метода с постоянным шагом обучения (параметром скорости настройки);
- сложность выбора подходящей скорости обучения α : слишком малая скорость обучения увеличивает время обучения и приводит к скатыванию нейронной сети в локальный минимум, а большая скорость обучения может привести к пропуску глобального минимума и сделать процесс обучения расходящимся;
- невозможность определения точек локального и глобального минимумов, так как градиентный метод их не различает;
- влияние случайной инициализации весовых коэффициентов нейронной сети на поиск минимума функции среднеквадратичной ошибки.

Последний пункт отражает то, что при разной инициализации синаптических связей могут получаться различные решения задачи. Это характеризует неустойчивость алгоритма обучения, когда нейронная сеть в одних случаях может обучаться до требуемой суммарной среднеквадратичной ошибки, а в других нет. То, что алгоритм обратного распространения ошибки не позволяет в общем случае достичь глобального минимума, не умаляет его достоинств, так как во многих практических задачах достаточно обучить нейронную сеть до требуемой среднеквадратичной ошибки. Является ли при этом найденный минимум локальным или глобальным, не имеет большого значения.

Алгоритм послонного обучения. Как отмечалось, сходимость алгоритма обратного распространения ошибки зависит от начальной инициализации синаптических связей. Это происходит из-за наличия локальных минимумов в целевой функции. В результате не всякая попытка приводит

к обучению нейронной сети, что характеризует неустойчивость алгоритмов обучения. Ниже приводится альтернативный алгоритм обучения нейронной сети, который при решении автором исследования [7] некоторых задач проявил 100%-ную устойчивость.

Рассмотрим теоретические основы алгоритма послойного обучения на примере нейронной сети с одним скрытым слоем, где в качестве функции активации используется гиперболический тангенс. Общая структура сети изображена на **рис. 3.2.8**.

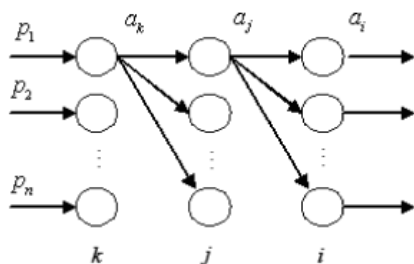


Рис. 3.2.8. Трехслойная нейронная сеть

При использовании гиперболического тангенса значение i -го нейрона выходного слоя определяется так:

$$a_i = \text{th}(n_i) = \frac{e^{n_i} - e^{-n_i}}{e^{n_i} + e^{-n_i}}, \quad (3.2.27)$$

где n_i характеризует взвешенную сумму i -го элемента.

Эта сумма определяется следующим образом:

$$n_i = \sum_j w_{ij} a_j + b_i. \quad (3.2.28)$$

Среднеквадратичная ошибка нейронной сети для одного образа

$$E = \frac{1}{2} \sum_i (t_i - a_i)^2. \quad (3.2.29)$$

Тогда при использовании алгоритма обратного распространения ошибки выражения для обучения нейронной сети можно представить следующим образом:

$$\begin{aligned} w_{ij}(t+1) &= w_{ij}(t) + \alpha(t)(t_i - a_i)(1 - a_i^2)a_j, \\ b_i(t+1) &= b_i(t) + \alpha(t)(t_i - a_i)(1 - a_i^2), \end{aligned} \quad (3.2.30)$$

где $\alpha(t)$ — адаптивный шаг обучения. Для сигмоидной функции активации и гиперболического тангенса соответственно [7]

$$\alpha(t) = \frac{4 \sum_j (t_j - a_j)^2 a_j (1 - a_j)}{\left(1 + \sum_i a_i^2\right) \sum_j (t_j - a_j)^2 a_j^2 (1 - a_j)^2},$$

$$\alpha(t) = \frac{\sum_j (t_j - a_j)^2 (1 - a_j^2)}{\left(1 + \sum_i a_i^2\right) \sum_j (t_j - a_j)^2 (1 - a_j)^2}.$$

Алгоритм послойного обучения предполагает наряду с настройкой весовых коэффициентов и порогов нейронных элементов модификацию выходов нейронных элементов скрытых слоев. Такая модификация осуществляется в соответствии с методом градиентного спуска:

$$a_i(t+1) = a_i(t) + \alpha(t) \frac{\partial E}{\partial a_i(t)}, \quad (3.2.31)$$

где $\alpha(t)$ — значение адаптивного шага обучения для модификации выходов нейронов скрытого слоя.

Найдем производную функции ошибки E по a_j . Тогда

$$\frac{\partial E}{\partial a_j} = \frac{\partial E}{\partial a_i} \frac{\partial a_i}{\partial n_i} \frac{\partial n_i}{\partial a_j} = \sum_i (t_i - a_i) (1 - a_i^2) w_{ij} = t_j - a_j, \quad (3.2.32)$$

где $(t_j - a_j)$ характеризует ошибку j -го нейронного элемента скрытого слоя.

Тогда

$$a_i(t+1) = a_i(t) - \alpha(t_i - a_i). \quad (3.2.33)$$

Для нахождения адаптивного шага обучения $\alpha(t)$ будем использовать метод наискорейшего спуска. В соответствии с ним

$$\alpha(t) = \min \left\{ E \left(y_i(t) - \alpha(t) \frac{\partial E}{\partial y_i(t)} \right) \right\}. \quad (3.2.34)$$

Взвешенная сумма

$$n_i(t+1) = \sum_j w_{ij} a_j(t) - b_i - \alpha \sum_j w_{ij} (t_j - a_j). \quad (3.2.35)$$

После преобразования этого выражения получим

$$n_i(t+1) = n_i(t) - \alpha \sum_j w_{ij} (t_j - a_j). \quad (3.2.36)$$

Разложим функцию $a_i(t+1) = \text{th}(n_i(t+1))$ в ряд Тейлора и преобразуем полученное выражение:

$$a_i(t+1) = a_i(t) - \alpha \sum_j (t_j - a_j) w_{ij}. \quad (3.2.37)$$

Отсюда среднеквадратичная ошибка сети

$$E = \frac{1}{2} \sum_i [a_i(t+1) - t_i]^2. \quad (3.2.38)$$

Находим такое значение α , при котором среднеквадратичная ошибка сети является минимальной:

$$\frac{\partial E}{\partial \alpha} = \sum_{j=1}^n \left[a_j - t_j - \alpha \sum_j (t_j - a_j) w_{ij} \right] \left[- \sum_j (t_j - a_j) w_{ij} \right], \quad (3.2.39)$$

откуда значение адаптивного шага обучения

$$\alpha = \frac{\sum_i (t_i - a_j) \sum_j (t_j - a_j) w_{ij}}{\sum_i \left[\sum_j w_{ij} (t_j - a_j) \right]^2}. \quad (3.2.40)$$

В результате получаем, что выходы нейронных элементов скрытого слоя должны модифицироваться на основе выражения

$$a_j(t+1) = a_j(t) - \alpha (t_j - a_j). \quad (3.2.41)$$

Определяя при помощи последнего выражения эталонные выходы \bar{a}_j нейронных элементов скрытого слоя, можно отдельно рассматривать обучение скрытого слоя сети. При этом ошибка j -го нейронного скрытого слоя

$$\overline{t_j - a_j} = a_j - \bar{a}_j, \quad (3.2.42)$$

где a_j — реальное выходное значение j -го нейрона скрытого слоя.

Так как область значений D функции гиперболического тангенса принадлежит отрезку $[-1, 1]$, то после получения эталонных выходов \bar{a}_j необходимо их нормализовать. Для этого находим максимальное значение среди эталонных выходов всех образов

$$a_m = \max_{k,i} |a_i^k|, \quad (3.2.43)$$

где $i = \overline{1, l}$, $k = \overline{1, L}$.

Если значение $a_m \in D$, то нормализация не происходит. В противном случае производится пересчет всех \bar{a}_i в соответствии с выражением

$$a_j^{-k} = \frac{\bar{a}_j^k}{a_m}. \quad (3.2.44)$$

Затем происходит изменение весовых коэффициентов нейронных элементов выходного слоя

$$w_{ij} = a_m w_{ij}, \quad (3.2.45)$$

где $i = \overline{1, l}$, $j = \overline{1, m}$.

Алгоритм послойного обучения состоит из следующих шагов.

1. Случайная инициализация весовых коэффициентов нейронной сети и задание минимальной среднеквадратичной ошибки E_m .
2. На вход сети последовательно подаются L входных образов, и для последнего слоя весовые коэффициенты и пороги нейронных элементов модифицируются в соответствии с (3.2.30).
3. На вход сети подаются последовательно L входных образов, и выходные значения a_j нейронов скрытого слоя модифицируются в соответствии с (3.2.41).
4. Шаги 2 и 3 повторяются до тех пор, пока суммарная среднеквадратичная ошибка сети не станет меньше, чем заданная.
5. Для L входных образов модифицируются весовые коэффициенты и пороги следующего слоя нейронной сети. При этом ошибка i -го нейронного элемента $t_j - a_j = a_j - \bar{a}_j$.
6. Процедура повторяется начиная с шага 2, пока суммарная среднеквадратичная ошибка сети не станет меньше заданной.

На практике нам не удалось найти отличий между этими двумя алгоритмами, поэтому мы пользовались более простым и доступным (в системе «Matlab Neural Network Toolbox» и в «STATISTICA Neural Networks») алгоритмом обратного распространения ошибки с адаптивным шагом обучения.

3.3. Обратная задача по идентификации основных параметров модели дробной диффузии в одномерном случае

3.3.1. Постановка обратной задачи

Обратная задача по идентификации параметров дробной диффузии в одномерном случае имеет следующую постановку.

- Задано начальное распределение концентрации $C_0(x)$ и распределение концентрации $C_1(x)$ через некоторый момент времени t_1 (рис. 3.3.1). Предполагается, что процесс распространения описывается уравнением дробной диффузии (3.1.1). Коэффициент диффузии D постоянный. Конвективный перенос отсутствует.
- Необходимо определить порядок дробной диффузии α и коэффициент скошенности β .

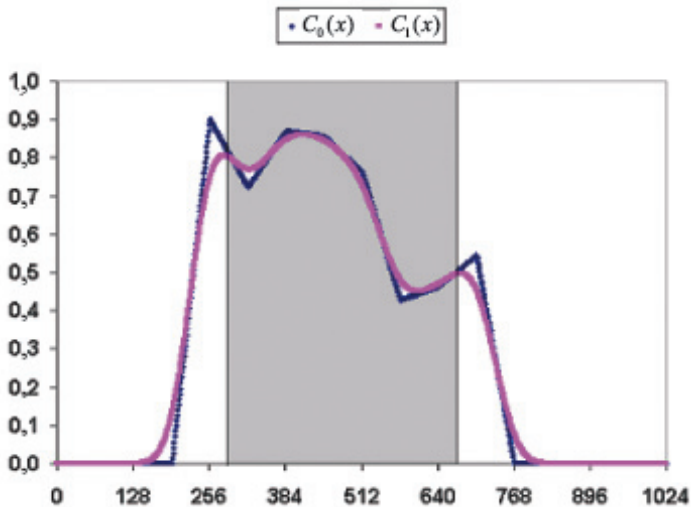


Рис. 3.3.1. Профили концентрации $C_0(x)$ и $C_1(x)$

3.3.2. Методика решения обратной задачи

В данном подразделе изучается способность нейронных сетей идентифицировать параметры дробной диффузии (порядок дробной диффузии $\alpha \in [1, 2]$, коэффициент скошенности $\beta \in [-1, 1]$) в случае одномерной задачи. Для простоты рассматривается уравнение дробной диффузии

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v \frac{\partial C}{\partial x} + (1 + \beta) \frac{D}{2} \frac{\partial^\alpha C}{\partial x^\alpha} + (1 - \beta) \frac{D}{2} \frac{\partial^\alpha C}{\partial (-x)^\alpha} \quad (3.3.1)$$

с параметрами $v = 0$ и $D = 1$.

В качестве нейронной сети выбран многослойный перцептрон с двумя скрытыми слоями, поскольку этот тип сети дает наибольшие возможности при исследовании нелинейных зависимостей. Выходными параметрами нейронной сети являются порядок дробной диффузии и коэффициент скошенности. Чтобы облегчить процесс обучения (оставить один выходной параметр) и добиться большей точности, предлагается разделить задачу, т. е. построить две одинаковые сети. В одной выходным параметром положить порядок дробной диффузии, а в другой — коэффициент скошенности. Что же касается входного слоя, то для его формирования можно придумать много способов. С одной стороны, чтобы точнее описать всю сложность процесса, нужно взять как можно больше входных параметров, с другой стороны, это сильно затрудняет обучение нейронной сети. Только опыт может показать, какой способ лучше.

Ниже рассматриваются четыре различных способа формирования входного слоя. Обучение нейронных сетей проводилось с помощью пакета программ «STATISTICA Neural Networks». Расчет обучающих и тестовых данных производился методом Фурье на сетке, содержащей 1024 точки.

3.3.3. Определение параметров дробной диффузии для точечного источника

Один из самых простых и очевидных способов построения входного набора состоит в задании нескольких профилей концентрации через определенные промежутки времени.

Расчеты проводились для сети с 50 входными параметрами. Три профиля концентрации задавались 48 точками, первый профиль соответствовал профилю сеточной дельта-функции по прошествии времени t_0 , а каждый следующий профиль отделялся от предыдущего временем dt . Так как 16 точек недостаточно точно описывают поведение профиля, неразумно брать значение обычной концентрации. Поэтому использовались

интегральные значения концентрации (площадь в каждой ячейке). Схематический вид сети показан на **рис. 3.3.2**.

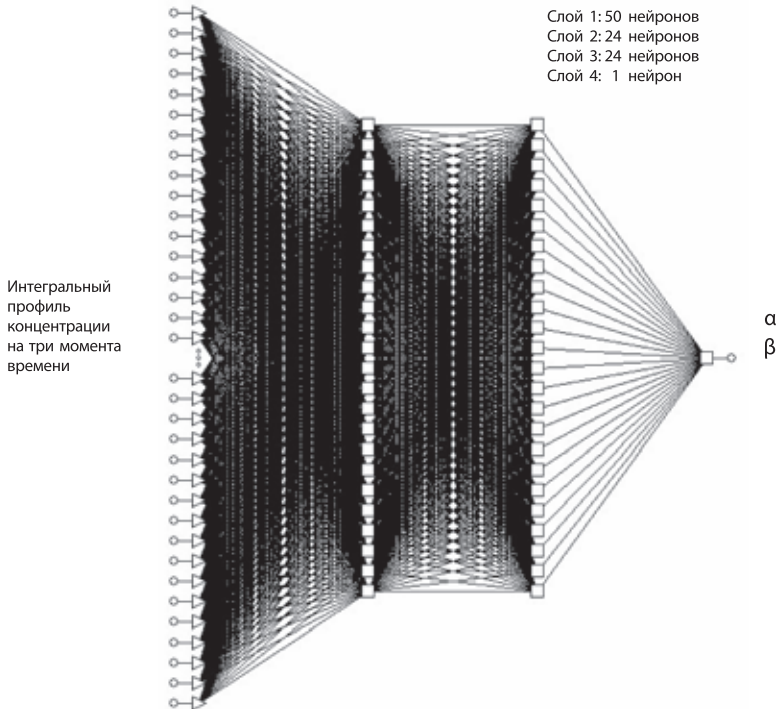


Рис. 3.3.2. Схематический вид нейронной сети для определения параметров дробной диффузии точечного источника

Обучающее множество было получено численным решением уравнения (3.3.1) при следующих значениях параметров: $\alpha \in [1, 1; 2]$ с шагом 0,1, $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,1, $t_0 \in [0, 1; 0, 5]$, с шагом 0,1, $dt \in [0, 1; 0, 5]$ с шагом 0,1; всего 5250 обучающих примеров.

Тестовое множество было получено решением того же уравнения с параметрами: $\alpha \in [1, 05; 1, 95]$ с шагом 0,1, $\beta \in [-0, 95; 0, 95]$ с шагом 0,1, $t_0 \in [0, 15; 0, 45]$ с шагом 0,1, $dt \in [0, 15; 0, 45]$ с шагом 0,1; всего 3200 тестовых примеров.

Таким образом, примеры из обучающего и тестового множеств не совпали. На **рис. 3.3.3** и **3.3.4** приведены графики действительных значений параметров α и β , а также значений, определенных с помощью нейронных сетей.

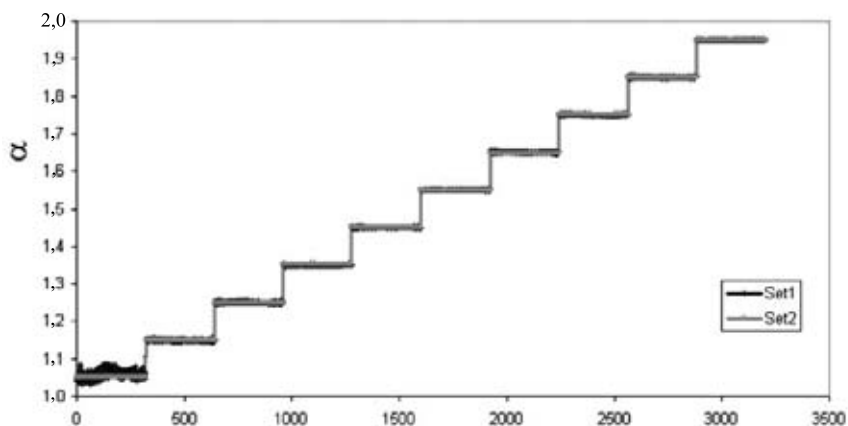


Рис. 3.3.3. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде дельта-функции (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

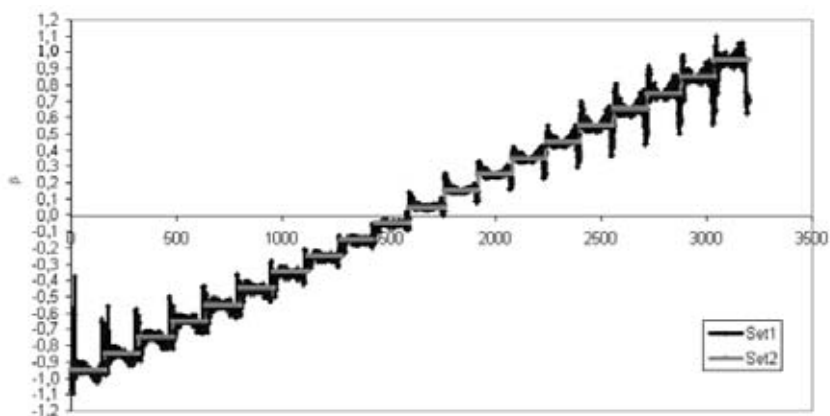


Рис. 3.3.4. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде дельта-функции (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Из графиков видно, что результаты, полученные с помощью данных нейронных сетей, достаточно точны для определения параметра α (средняя ошибка определения α равна 0,004, максимальная ошибка определения

α — 0,02) и недостаточно точны для определения параметра β (средняя ошибка определения β равна 0,06, максимальная ошибка определения β — 0,57). Также из графика видно, что наибольшее расхождение для β наблюдается в области $\alpha \approx 1$ и $\alpha \approx 2$. Это связано с тем, что при малых α смещение профиля велико, а при $\alpha \approx 2$ оно почти незаметно, и, возможно, в этих областях способность нейронной сети определить зависимость уменьшается. Интересно посмотреть, будет ли нейронная сеть давать такие же результаты, если в качестве тестового множества использовать множество, полученное при тех же значениях параметров, но для других функций. На **рис. 3.3.5—3.3.10** приведены результаты, полученные для функции Гаусса, двух дельта-функций и трех дельта-функций соответственно. Из них можно сделать вывод, что данные сети нельзя использовать для идентификации параметров дробной диффузии для функций, отличных от обучающих. Для повышения точности определения параметров рассмотрим другой способ построения сети.

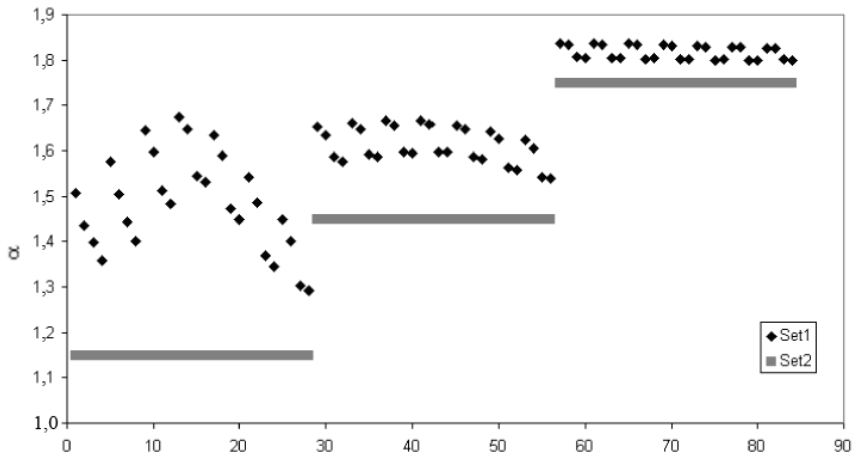


Рис. 3.3.5. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде функции Гаусса (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

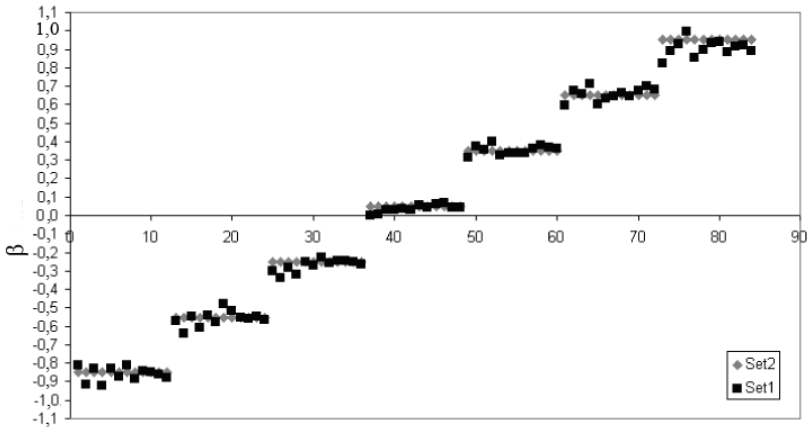


Рис. 3.3.6. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде функции Гаусса (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

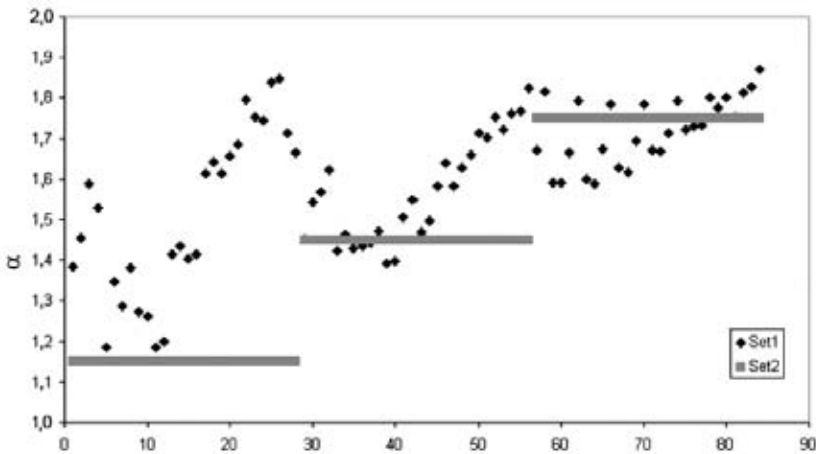


Рис. 3.3.7. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде двух дельта-функций (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

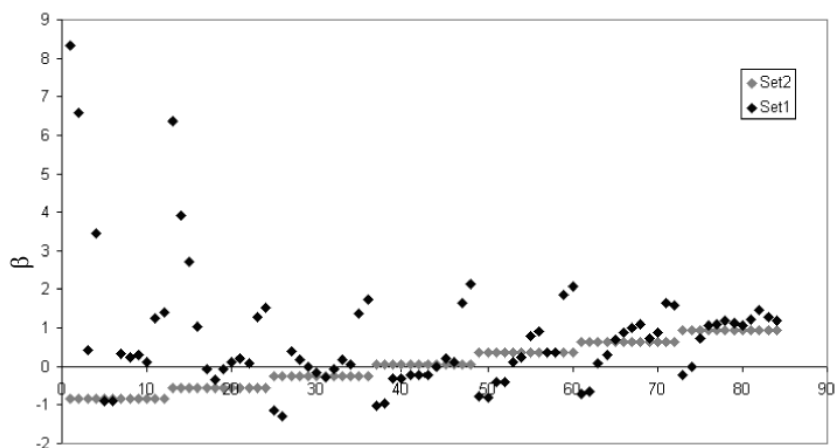


Рис. 3.3.8. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде двух дельта-функций (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

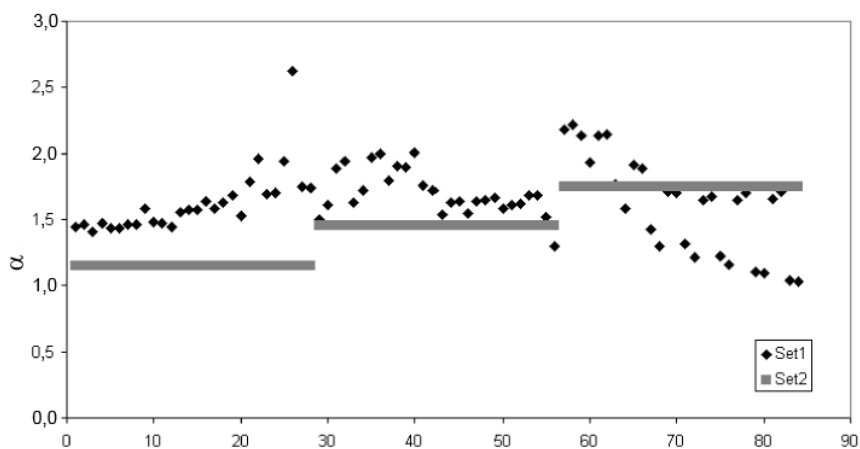


Рис. 3.3.9. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде трех дельта-функций (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

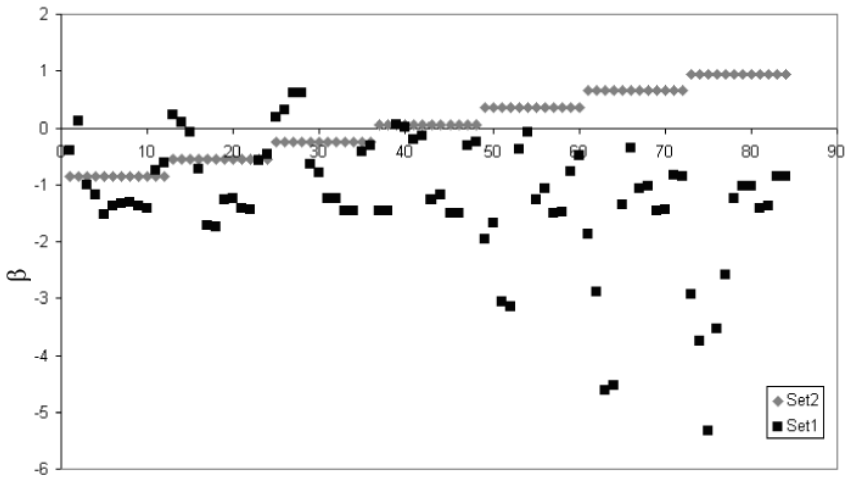


Рис. 3.3.10. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде трех дельта-функций (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

3.3.4. Альтернативный способ определения параметров дробной диффузии для точечного источника

В связи с тем, что при разных α и одном и том же dt профиль концентрации ведет себя по-разному (при малых α смещение профиля велико, а при $\alpha \approx 2$ оно почти незаметно) и это предположительно снижает степень обучаемости нейронной сети, предлагается выбирать профили концентрации не через промежутки времени, а через время, за которое максимум концентрации уменьшится (для определения α) или сместится (для определения β) на заданную величину.

Расчеты проводились для сети с 50 входными параметрами. Три профиля концентрации задавались 48 точками, первый профиль соответствовал профилю сеточной дельта-функции в момент, когда ее максимум уменьшился на заданное количество процентов (для определения α) или сместился на заданное количество ячеек (для определения β) от максимума дельта-функции в момент, когда отношение максимума к ширине на полувысоте равнялось 20 (аналог t_0). Каждый следующий профиль определялся уменьшением максимума на заданное количество процентов (для определения α) или смещением максимума на заданное количество ячеек

(для определения β) относительно предыдущего положения (аналог dt). Использовались интегральные значения концентрации — площадь в каждой ячейке. Схематический вид сети показан на **рис. 3.3.2**.

Обучающее множество было получено решением уравнения (3.3.1) со следующими значениями параметров: $\alpha \in [1, 2]$ с шагом 0,1, $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,1, аналог $t_0 \in [100\%; 40\%]$ с шагом 10%, аналог $dt \in [2\%; 8\%]$ с шагом 2%; всего 5680 обучающих примеров.

Тестовое множество было получено решением того же уравнения с параметрами: $\alpha \in [1,05; 1,95]$ с шагом 0,1, $\beta \in [-0,95; 0,95]$ с шагом 0,1, аналог $t_0 \in [95\%; 35\%]$ с шагом 10%, аналог $dt \in [3\%; 9\%]$ с шагом 2%; всего 2500 тестовых примеров.

На **рис. 3.3.11** и **3.3.12** приведены графики действительных значений параметров α и β , а также значений, определенных с помощью нейронных сетей.

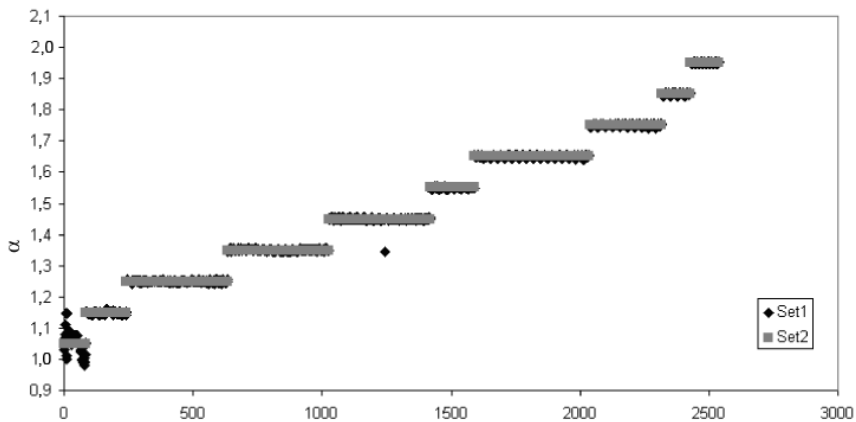


Рис. 3.3.11. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде дельта-функции (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

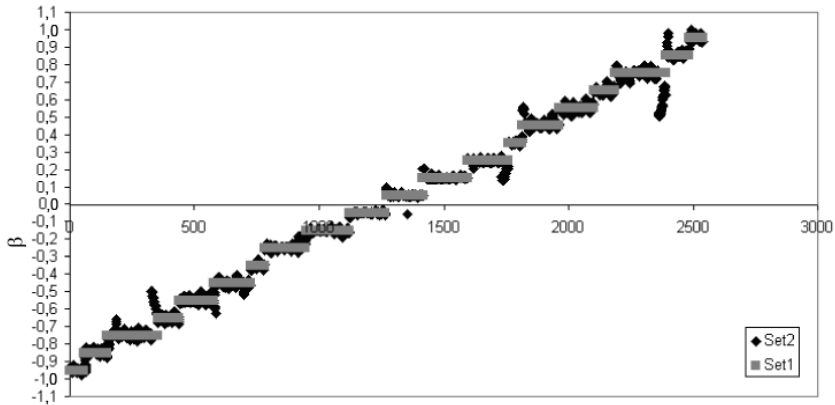


Рис. 3.3.12. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде дельта-функции (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Из графиков видно, что результаты, полученные с помощью данных нейронных сетей, увеличили точность определения α (средняя ошибка — 0,003, максимальная ошибка — 0,1) и точность определения параметра β (средняя ошибка равна — 0,009, максимальная ошибка — 0,25). На **рис. 3.3.13—3.3.16** для сравнения приведены результаты, полученные для функции Гаусса и двух дельта-функций соответственно, из которых можно сделать вывод, что эти сети нельзя использовать для идентификации параметров дробной диффузии для функций, отличных от обучающих. Чтобы повысить точность определения параметров для функций, отличных от обучаемой, рассмотрим следующий способ построения сети.

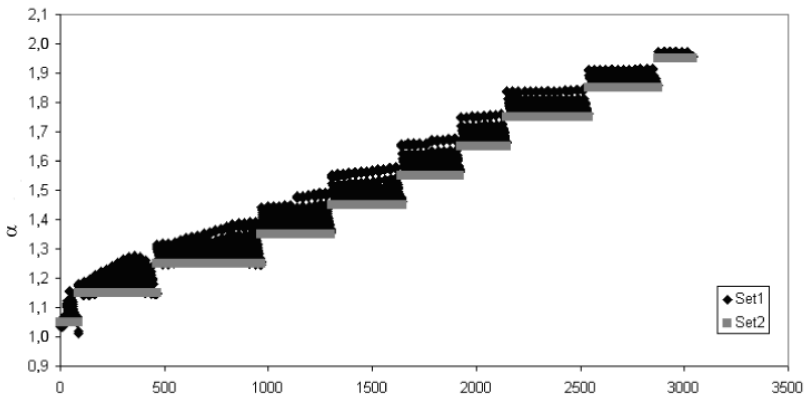


Рис. 3.3.13. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде функции Гаусса (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

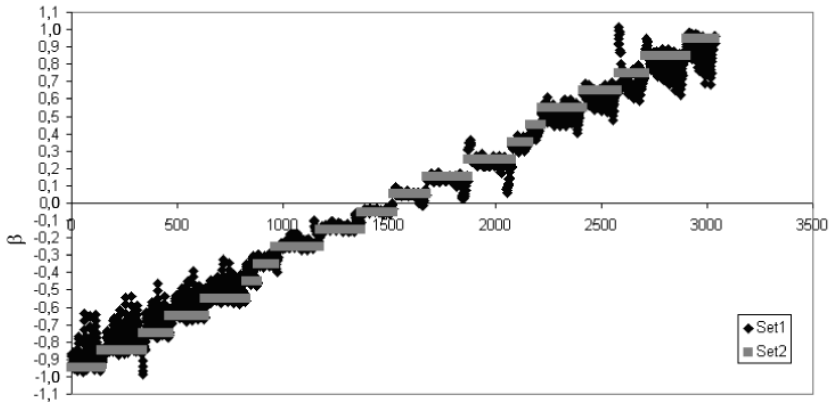


Рис. 3.3.14. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде функции Гаусса (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

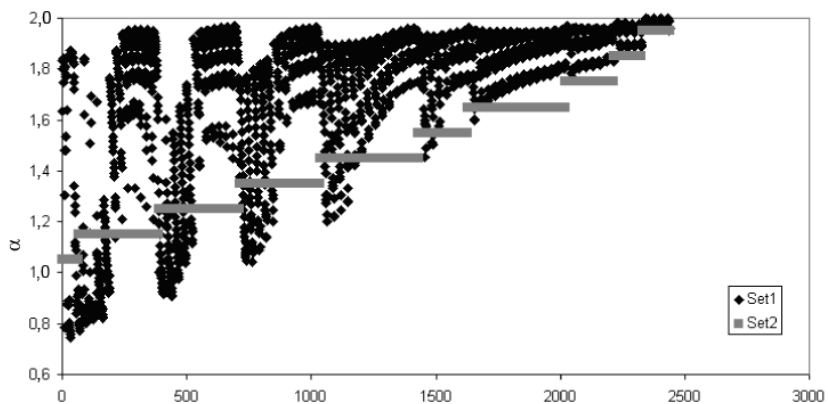


Рис. 3.3.15. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде двух дельта-функций (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

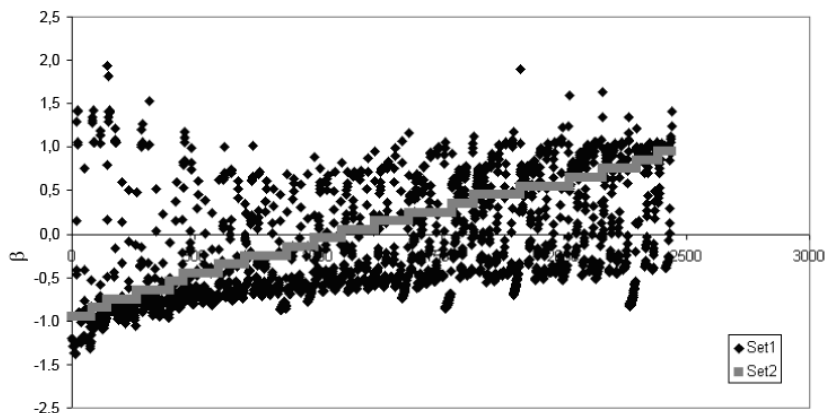


Рис. 3.3.16. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде двух дельта-функций (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

3.3.5. Построение сети, способной определять параметры дробной диффузии для произвольных распределений концентрации

Исходя из рассмотренных выше способов, можно сделать вывод, что удовлетворительные результаты получаются при совпадении обучающей и тестовой функций. Тогда можно предположить, что если обучить сеть на большом количестве разных функций, то ее можно будет использовать для любых профилей концентрации. Исследование этого подхода рассматривается ниже.

Расчет производился для сети с 32 входными параметрами (рис. 3.3.17). Два профиля концентрации задавались 32 точками. Обучающее множество рассчитывалось для 20 произвольных функций при каждом значении параметров α и β , полученных соединением прямыми отрезками случайным образом выбранных точек.

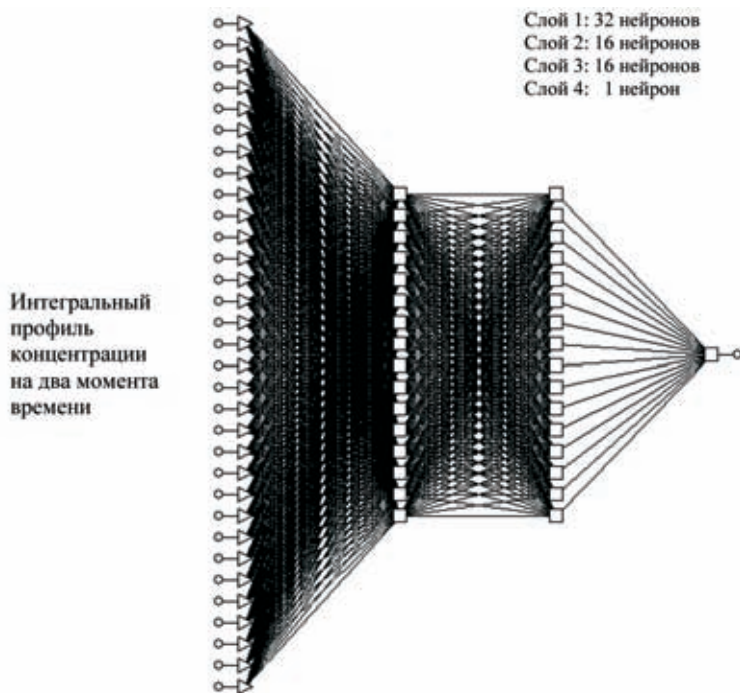


Рис. 3.3.17. Схематический вид сети для определения параметров дробной диффузии произвольных функций

Здесь приводятся результаты для сети с двумя профилями концентраций во входном слое сети в отличие от предыдущих способов. Это заметно облегчает обучение нейронной сети и к тому же дает лучшие результаты. Начальное распределение концентрации было образовано соединением прямой линией случайно распределенных точек в средних восьми ячейках.

Обучающее множество было получено решением уравнения (3.3.1) со следующими значениями параметров: $\alpha \in [1, 05; 2]$ с шагом 0,05, $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,05; всего 16 000 обучающих примеров (20 реализаций для каждой пары параметров).

Тестовое множество было получено решением того же уравнения с параметрами: $\alpha \in [1, 025; 1, 975]$ с шагом 0,05, $\beta \in [-0, 975; 0, 975]$ с шагом 0,05; всего 32 000 тестовых примеров (40 реализаций для каждой пары параметров).

На **рис. 3.3.18** и **3.3.19** приведены графики действительных значений α и β , а также значений, определенных с помощью нейронных сетей.

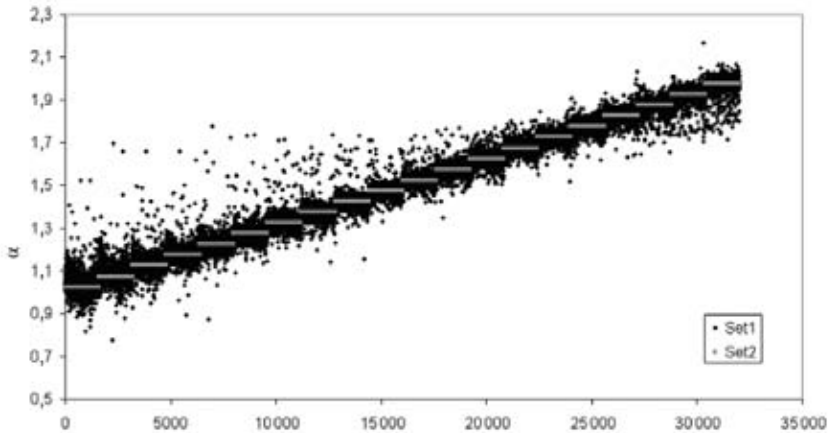


Рис. 3.3.18. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде произвольных функций (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

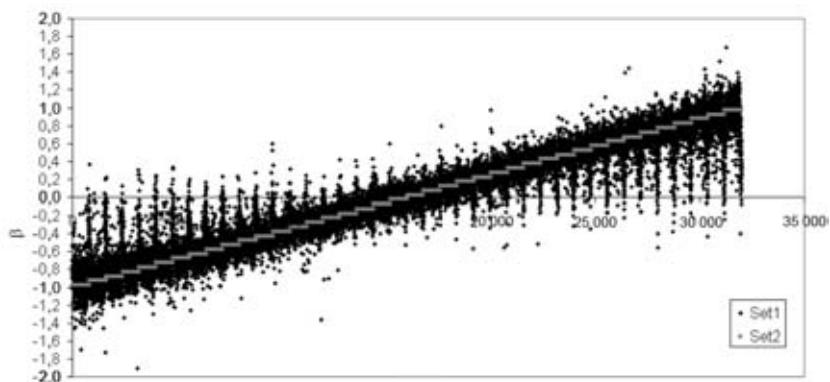


Рис. 3.3.19. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде произвольных функций (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Из графиков видно, что результаты, полученные с помощью нейронных сетей, неудовлетворительны как для порядка дробной диффузии (средняя ошибка — 0,037, максимальная ошибка — 0,62), так и для коэффициента скошенности (средняя ошибка — 0,16, максимальная ошибка — 1,36). Не будем приводить графики для дельта-функции и функции Гаусса, поскольку они показывают гораздо худшие результаты. Неудачный опыт построения сети с таким достаточно большим количеством обучающих примеров для определения параметров дробной диффузии произвольных распределений концентрации приводит к выводу, что если и можно построить такую универсальную сеть для любых функций, то это требует гораздо большей вычислительной мощности, что не позволяет использовать для этих целей персональные компьютеры.

3.3.6. Рекомендации по определению параметров дробной диффузии

Подводя итог всех полученных результатов, можно сделать следующие выводы.

1. Нецелесообразно строить универсальную нейронную сеть, достаточно точно определяющую параметры дробной диффузии для любых профилей концентрации.
2. Можно построить нейронную сеть, достаточно точно определяющую параметры дробной диффузии, для каждого конкретного профиля концентрации.

3. Обезразмеривание интервала между профилями концентрации позволяет более точно определять параметры дробной диффузии.
4. Достаточно использовать профили концентраций всего в два момента времени.
5. Если обучать сеть для конкретной функции (начальный профиль — одинаковый во всех примерах), то остается всего один профиль концентраций, подаваемый на вход нейронной сети (всего 16 параметров).
6. Задачу можно разделить: сначала определить порядок дробной диффузии, а затем, зная его, найти коэффициент скошенности.

Предлагается следующая последовательность шагов по решению задачи (**рис. 3.3.20**).

1. Измерение профиля концентрации в начальный момент времени $C_0(x)$.
2. Измерение профиля концентрации через некоторый момент времени $C_1(x)$.
3. Выбор x_1 и x_2 таким образом, чтобы они отсекали равные площади (S — общая площадь; S_1 — площадь между x_1 и x_2).
4. Определение $(S - S_1) / S$.
5. Обучение нейронной сети (**рис. 3.3.21**), на вход которой подается профиль концентрации при разных значениях параметров дробной диффузии в тот момент времени, когда отношение $\Delta S_1 / S$ принимает значение, определенное в п. 4.
6. Подача на вход обученной сети $C_1(x)$ и определение порядка дробной диффузии.
7. Обучение нейронной сети, на вход которой подается профиль концентрации при разных значениях коэффициента скошенности в тот момент времени, когда отношение $(S - S_1) / S$ принимает значение, определенное в п. 4.
8. Подача на вход обученной сети $C_1(x)$ и определение коэффициента скошенности.

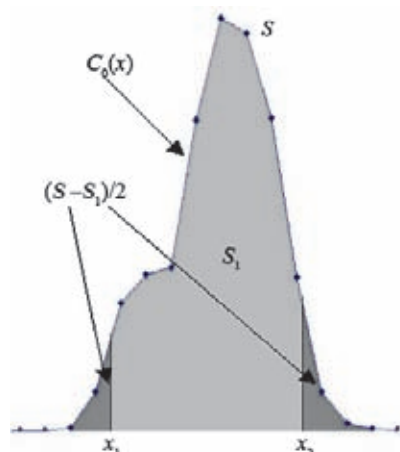


Рис. 3.3.20. Схематический вид профиля концентрации

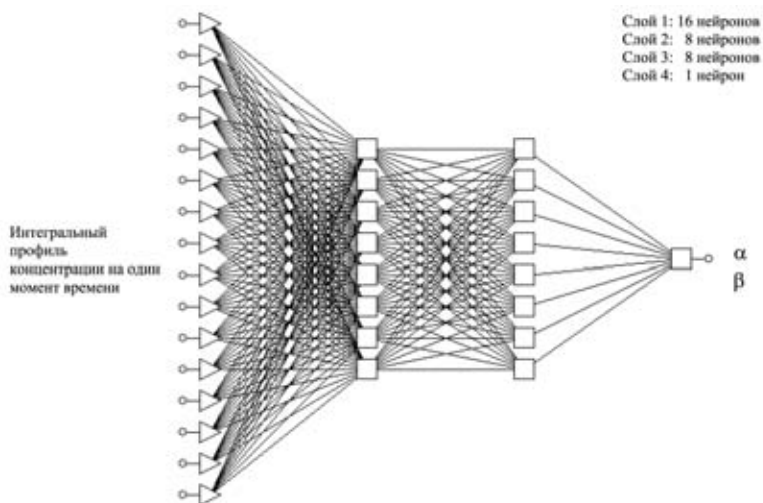


Рис. 3.3.21. Схематический вид нейронной сети для определения параметров дробной диффузии

По этой методике были произведены расчеты для:

- дельта-функции (рис. 3.3.22);
- функции Гаусса, полученной из дельта-функции решением классического уравнения диффузии с $t = 0,03$;
- прямоугольника (рис. 3.3.27);
- произвольной функции (рис. 3.3.30).

Расчеты для определения порядка дробной диффузии производились:

- для обучающего множества при $\alpha \in [1, 1; 2]$ с шагом 0,025, $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,025; всего 3200 обучающих примеров;
- для тестового множества при $\alpha \in [1, 1125; 1, 9875]$ с шагом 0,025, $\beta \in [-0, 9875; 0, 9875]$ с шагом 0,025; всего 3200 тестовых примеров.

Расчеты для определения коэффициента скошенности производились при $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,001; всего 2000 обучающих примеров.

Построенные сети дали следующие результаты:

1. Дельта-функция:

- средняя ошибка определения порядка дробной диффузии 0,0001 (**рис. 3.3.23**);
- максимальная ошибка определения порядка дробной диффузии 0,0038;
- средняя ошибка определения коэффициента скошенности 0,01 (**рис. 3.3.24**);
- максимальная ошибка определения коэффициента скошенности 0,02.

2. Функция Гаусса:

- средняя ошибка определения порядка дробной диффузии 0,0003 (**рис. 3.3.25**);
- максимальная ошибка определения порядка дробной диффузии 0,0007;
- средняя ошибка определения коэффициента скошенности 0,0001 (**рис. 3.3.26**);
- максимальная ошибка определения коэффициента скошенности 0,0002.

3. Прямоугольник:

- средняя ошибка определения порядка дробной диффузии 0,0005 (**рис. 3.3.28**);
- максимальная ошибка определения порядка дробной диффузии 0,0023;
- средняя ошибка определения коэффициента скошенности 0,0009 (**рис. 3.3.29**);
- максимальная ошибка определения коэффициента скошенности 0,0016.

4. Произвольная функция:

- средняя ошибка определения порядка дробной диффузии 0,00009 (**рис. 3.3.31**);
- максимальная ошибка определения порядка дробной диффузии 0,0004;
- средняя ошибка определения коэффициента скошенности 0,0005 (**рис. 3.3.32**);
- максимальная ошибка определения коэффициента скошенности 0,001.

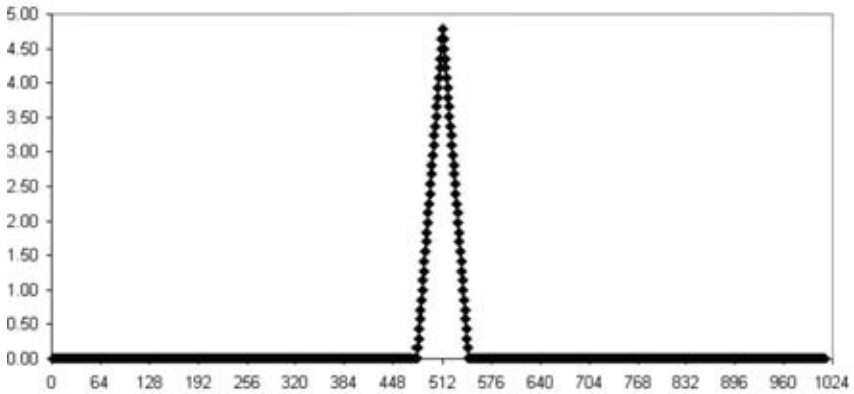


Рис. 3.3.22. Профиль концентрации в виде дельта-функции

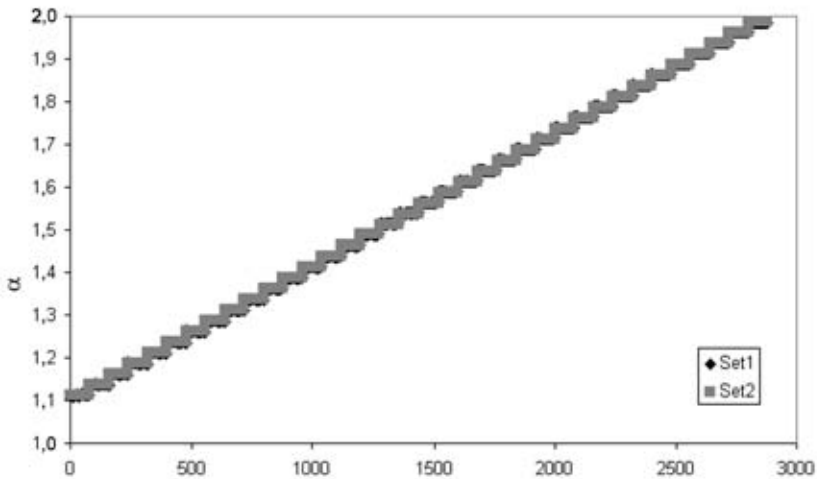


Рис. 3.3.23. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде дельта-функции (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

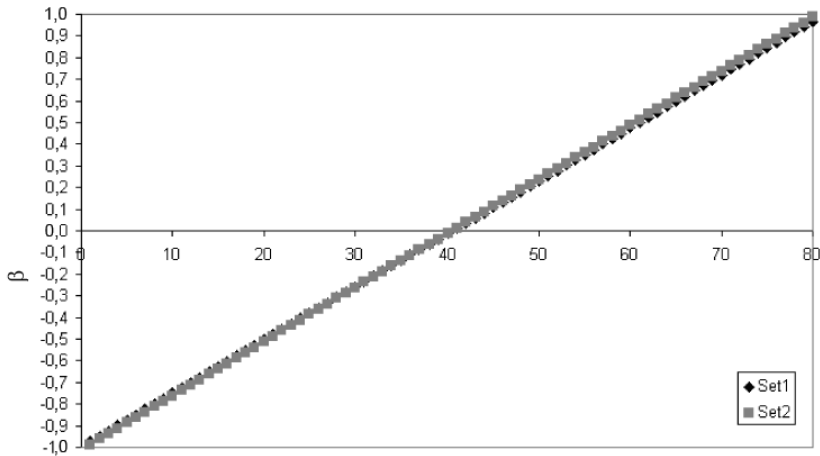


Рис. 3.3.24. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде дельта-функции (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

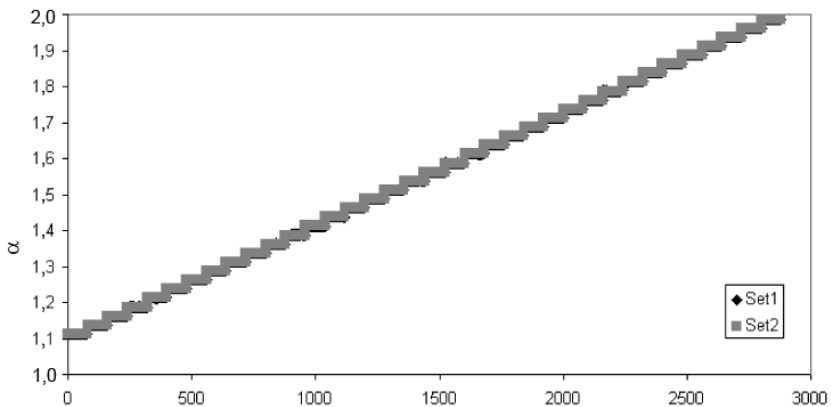


Рис. 3.3.25. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде функции Гаусса (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

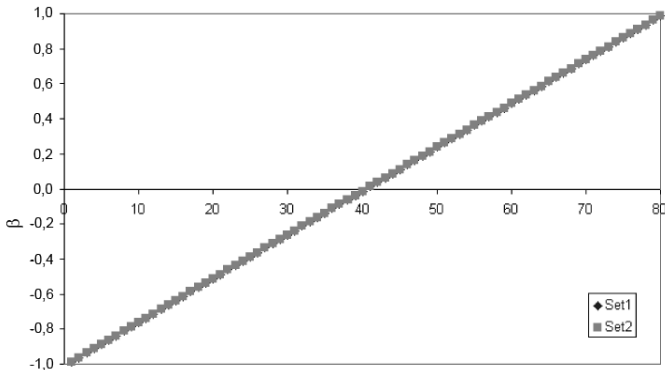


Рис. 3.3.26. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде функции Гаусса (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

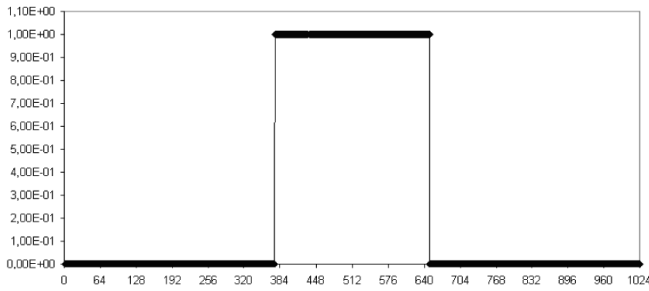


Рис. 3.3.27. Профиль концентрации в виде прямоугольника

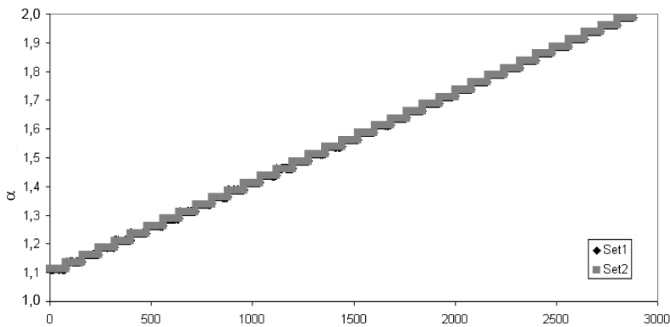


Рис. 3.3.28. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде прямоугольника (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

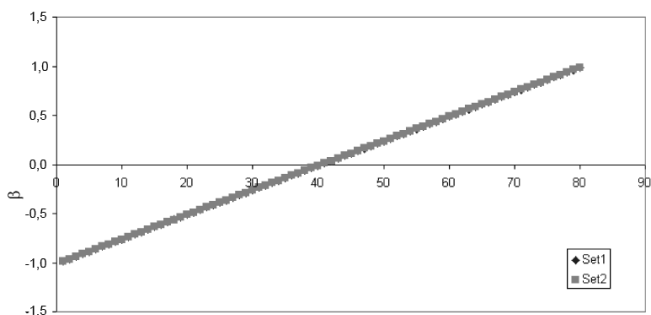


Рис. 3.3.29. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде прямоугольника (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

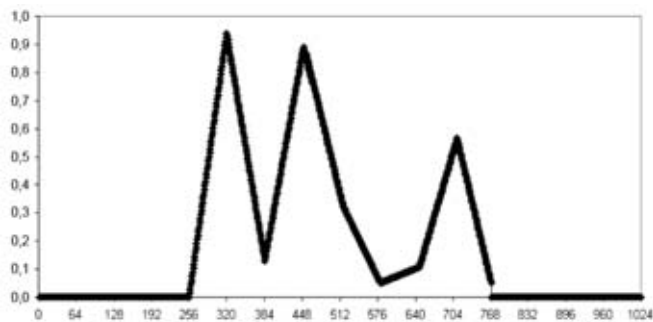


Рис. 3.3.30. Профиль концентрации в виде произвольной функции

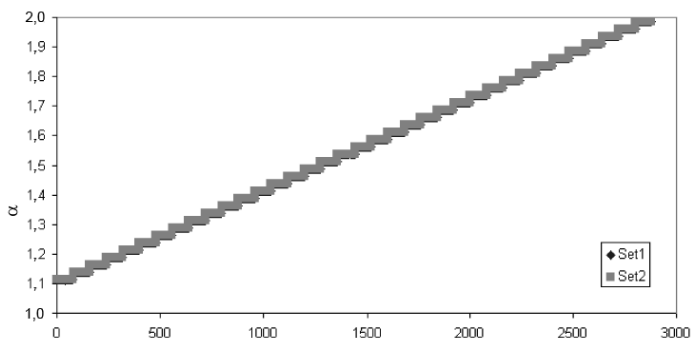


Рис. 3.3.31. Графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде произвольной функции (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

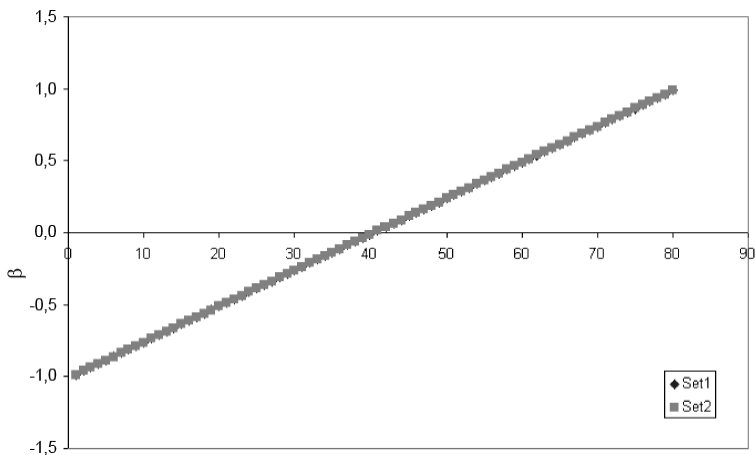


Рис. 3.3.32. Графики действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети, для профиля концентрации в виде произвольной функции (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Полученные удовлетворительные результаты для четырех видов функций позволяют, на наш взгляд, считать эту методику определения параметров дробной диффузии достойной применения в практических задачах.

3.3.7. Исследование влияния количества обучающих примеров на точность определения параметров дробной диффузии

Все описанные выше исследования по построению и обучению нейронных сетей проводились при достаточно большом количестве обучающих примеров (3000 и более). При столь большом наборе обучающих примеров с помощью метода, предложенного в предыдущем подразделе, оценки параметров дробной диффузии получены с очень высокой точностью (0,001 и менее). В реальных задачах такая точность, как правило, не нужна, поэтому интересно рассмотреть, как зависит точность определения параметров дробной диффузии от количества обучающих примеров.

Ниже приведены результаты исследований точности определения порядка дробной диффузии в зависимости от количества обучающих примеров для функции, представленной на **рис. 3.3.33**.

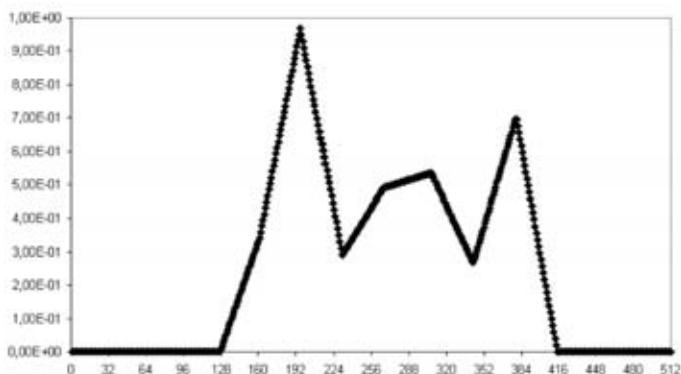


Рис. 3.3.33. Профиль концентрации, использовавшийся при исследовании зависимости точности определения порядка дробной диффузии от количества обучающих примеров

Расчеты были проведены при следующих наборах обучающих примеров:

- 15 примеров; $\alpha \in [1, 1; 2]$ с шагом 0,45, $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,5;
- 45 примеров; $\alpha \in [1, 1; 2]$ с шагом 0,225, $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,25;
- 210 примеров; $\alpha \in [1, 1; 2]$ с шагом 0,1, $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,1;
- 779 примеров; $\alpha \in [1, 1; 2]$ с шагом 0,05, $\beta \in [-1; 1]$ с шагом 0,05.

На **рис. 3.3.34** приведены графики зависимости максимальной и среднеквадратичной ошибок в зависимости от количества обучающих примеров. Из графиков видно, что для достижения точности порядка 1—10% (характерной для реальных задач) достаточно обучать нейронную сеть на 15—45 примерах.

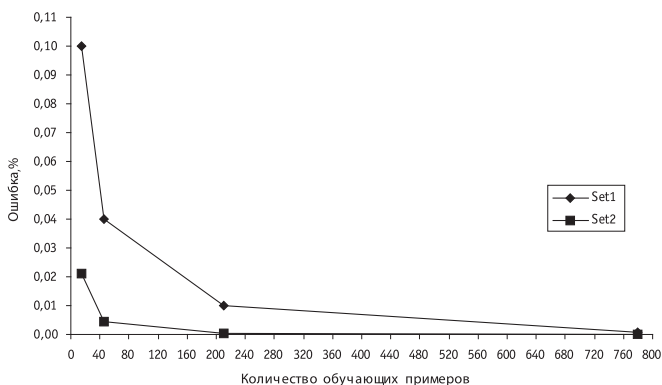


Рис. 3.3.34. Графики зависимости ошибки определения порядка дробной диффузии от количества обучающих примеров (Set1 — максимальное отклонение, Set2 — среднеквадратичное отклонение)

3.3.8. Исследование влияния шума на точность определения параметров дробной диффузии

Одним из немаловажных вопросов является устойчивость предложенного метода определения параметров дробной диффузии к внесению шума. В данной работе рассматривался шум следующего вида:

$$C^{\text{зашумленное}} = C^{\text{истинное}} \exp(\sigma\xi), \quad (3.3.2)$$

где σ — величина шума; $\xi \in (-0,5; 0,5)$ — равномерно распределенная случайная величина.

Расчеты проводились в области $\sigma \in (0; 1)$. Наименьшие ошибки наблюдались при порядках дробной диффузии, близких к 2, а наибольшие — при порядках дробной диффузии, близких к 1. В качестве примера здесь приведены результаты для порядков дробной диффузии 1,3125 и 1,8125 и коэффициента скошенности, равном 0, полученные с помощью многослойного персептрона с двумя скрытыми слоями (**рис. 3.3.35** и **3.3.36**). Также приведены результаты расчетов для многослойного персептрона с одним скрытым слоем для порядков дробной диффузии 1,3 и 1,8 (**рис. 3.3.37** и **3.3.38**). Расчеты производились следующим образом:

1. Интегральный профиль концентрации $C_0(x)$ в каждой из 16 ячеек подвергался зашумлению (**рис. 3.3.39**).
2. Для зашумленного профиля обучалась нейронная сеть.
3. Для истинного профиля рассчитывался профиль $C_1(x)$.
4. Профиль $C_1(x)$ зашумлялся (10 000 реализаций).

Зашумленный профиль подавался на вход обученной нейронной сети. Определялся порядок дробной диффузии.

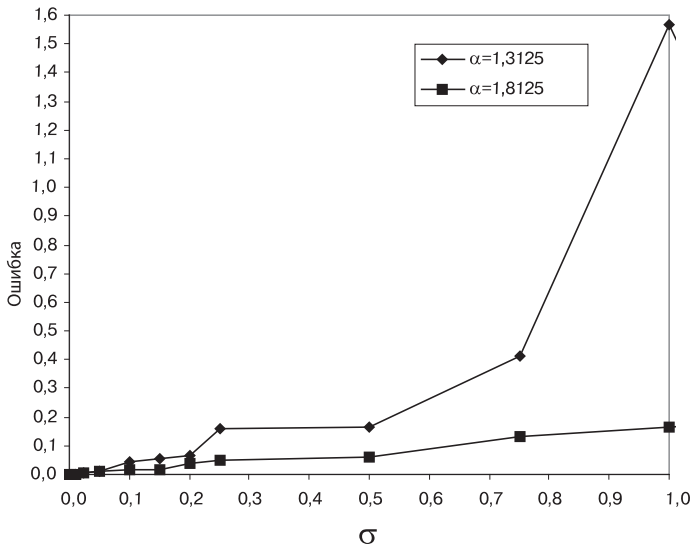


Рис. 3.3.35. Зависимость среднеквадратичной ошибки определения порядка дробной диффузии в зависимости от величины шума

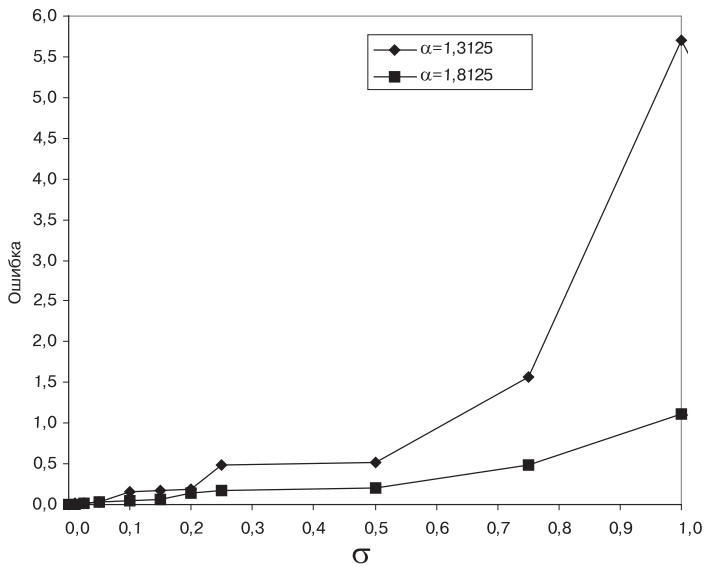


Рис. 3.3.36. Зависимость максимальной ошибки определения порядка дробной диффузии в зависимости от величины шума

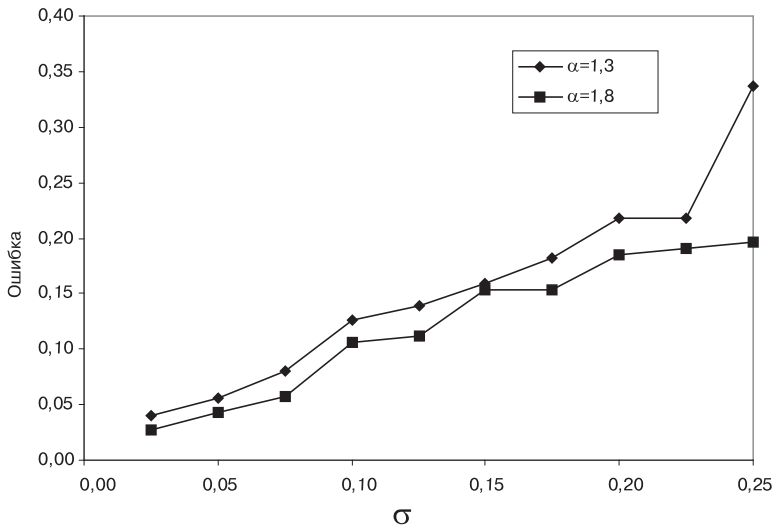


Рис. 3.3.37. Зависимость максимальной ошибки определения порядка дробной диффузии в зависимости от величины шума для перцептрона с одним скрытым слоем

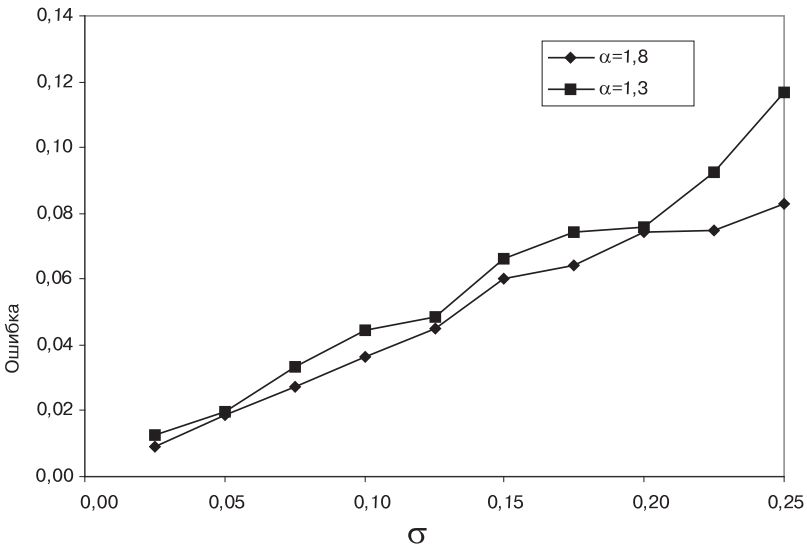


Рис. 3.3.38. Зависимость среднеквадратичной ошибки определения порядка дробной диффузии в зависимости от величины шума для перцептрона с одним скрытым слоем

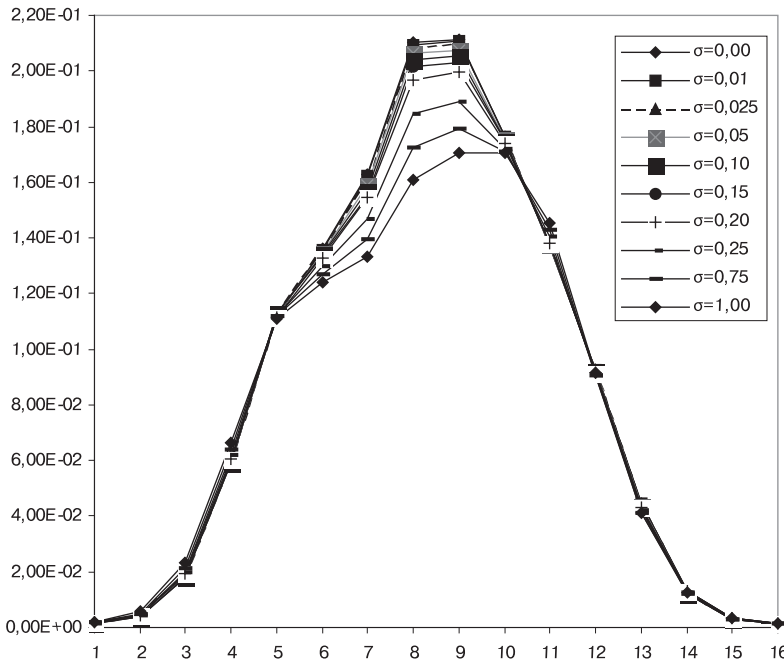


Рис. 3.3.39. Интегральный профиль концентрации при разных величинах шума. Таким образом, бралась одна реализация для $C_0(x)$ и 10 000 реализаций для $C_1(x)$. Исходя из данных **рис. 3.3.35—3.3.38**, можно сделать вывод, что предложенный метод дает достаточно хорошие результаты при уровнях шума $\sigma < 0,2$. На графиках видно, что метод более чувствителен к малым порядкам дробной диффузии.

3.4. Обратная задача по идентификации основных параметров дробной диффузии в двумерном случае

3.4.1. Постановка обратной задачи

Обобщение постановки обратной задачи по на двумерный случай выглядит следующим образом:

- Задано начальное распределение концентрации $C_0(x, y)$ (см. **рис. 3.1.1**) и распределение концентрации $C_1(x, y)$ (см. **рис. 3.1.2**) через

некоторый момент времени t_1 . Предполагается, что процесс распространения описывается уравнением дробной диффузии

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} = & (1+\beta_x) \frac{1}{2} D_x \frac{\partial^{\alpha_x} C}{\partial x^{\alpha_x}} + (1-\beta_x) \frac{1}{2} D_x \frac{\partial^{\alpha_x} C}{\partial (-x)^{\alpha_x}} + \\ & + (1+\beta_y) \frac{1}{2} D_y \frac{\partial^{\alpha_y} C}{\partial y^{\alpha_y}} + (1-\beta_y) \frac{1}{2} D_y \frac{\partial^{\alpha_y} C}{\partial (-y)^{\alpha_y}}. \end{aligned} \quad (3.4.1)$$

- Диффузия постоянна и изотропна, т. е. коэффициенты диффузии D_x и D_y равны. Конвективный перенос отсутствует.
- Необходимо определить порядки дробной диффузии α_x , α_y и коэффициенты скошенности β_x , β_y .

Как и в одномерном случае, замена

$$t^* = tD, \quad D_x = D_y = D \quad (3.4.2)$$

в уравнении (3.4.1) приводит к уравнению

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t^*} = & (1+\beta_x) \frac{1}{2} \frac{\partial^{\alpha_x} C}{\partial x^{\alpha_x}} + (1-\beta_x) \frac{1}{2} \frac{\partial^{\alpha_x} C}{\partial (-x)^{\alpha_x}} + \\ & + (1+\beta_y) \frac{1}{2} \frac{\partial^{\alpha_y} C}{\partial y^{\alpha_y}} + (1-\beta_y) \frac{1}{2} \frac{\partial^{\alpha_y} C}{\partial (-y)^{\alpha_y}}, \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

которое не содержит неизвестных коэффициентов диффузии, что сильно облегчает задачу. Но в уравнении (3.4.3) t^* — уже не время, а некий параметр. Поэтому в качестве интервала времени между профилями $C_0(x, y)$ и $C_1(x, y)$ нельзя использовать время t_1 . В двумерном случае будем использовать следующий безразмерный параметр:

$$\delta = \frac{\sum_{i,j} |C_{ij}^0 - C_{ij}^1|}{\sum_{i,j} C_{ij}^0}. \quad (3.4.4)$$

В подразделе 3.1.3 было показано, что использование искусственных нейронных сетей для одномерного случая предпочтительнее простого метода перебора, поэтому обобщим методику, применявшуюся при решении одномерной задачи, на двумерный случай.

3.4.2. Методика решения обратной задачи

В качестве нейронной сети выбран, как и в одномерном случае, многослойный перцептрон с двумя скрытыми слоями. Количество нейронов в каждом из скрытых слоев равно половине нейронов входного слоя (так рекомендуют авторы программы «STATISTICA Neural Networks»). Выходными параметрами нейронной сети являются порядки дробной диффузии и коэффициенты скошенности. Как, в одномерном случае, разделим задачу. Сначала построим две сети для определения порядков дробной диффузии, а затем при известных порядках дробной диффузии построим две сети для определения коэффициентов скошенности.

Обучение нейронных сетей велось с помощью пакета программ «STATISTICA Neural Networks». Расчет обучающих и тестовых данных производился методом Фурье на расчетной сетке 64×64 . Далее, как и в одномерном случае, составлялась меньшая агрегированная сетка. Значения в ее ячейках определялись суммарной концентрацией в ячейках расчетной сетки, лежащих внутри агрегированной ячейки, и уже значения в ячейках агрегированной сетки подавались на вход нейронной сети.

3.4.3. Исследование различных способов представления информации на входе нейронной сети

В двумерном случае задача заметно усложнилась. Во-первых, количество параметров на входе в нейронную сеть стало N^2 (в отличие от N в одномерном случае), где N — количество агрегированных ячеек по одной оси. Во-вторых, в связи с тем, что количество параметров дробной диффузии увеличилось в два раза, размер обучающего множества также возрос согласно квадратичному закону. В-третьих, численное решение уравнения дробной диффузии стало более ресурсоемким, поскольку число вычислительных операций увеличилось также согласно квадратичному закону. Первое наиболее существенно, поскольку на персональном компьютере средней мощности при использовании программы «STATISTICA Neural Networks» не удалось обучить сеть с более чем 100 входными параметрами. А это значит, что уже нельзя взять, как в одномерном случае, 16 ячеек в одном направлении. Поэтому важно рассмотреть вопрос точности определения параметров дробной диффузии в зависимости от количества входных параметров.

Расчеты проводились для представленного на рис. 3.1.1 начального распределения при 64 (агрегированная сетка 8×8), 36 (агрегированная сетка 6×6) и 16 (агрегированная сетка 4×4) входных параметрах. Это распределение получено соединением прямыми линиями случайно распределенных точек в области от 0 до 1. Параметр δ из (3.4.4) был равен 0,04. Вид

распределения при $\delta = 0,04$, $\alpha_x = 2$, $\alpha_y = 2$, $\beta_x = 1$ и $\beta_y = 1$ приведен на **рис. 3.1.2**.

Обучающее множество рассчитывалось при $\alpha_x \in [1,1; 2]$ с шагом 0,45, $\alpha_y \in [1,1; 2]$ с шагом 0,45, $\beta_x \in [-1; 1]$ с шагом 0,5, $\beta_y \in [-1; 1]$ с шагом 0,5; всего 225 обучающих примеров.

Тестовое множество рассчитывалось при $\alpha_x \in [1,325; 1,775]$ с шагом 0,45, $\alpha_y \in [1,325; 1,775]$ с шагом 0,45, $\beta_x \in [-0,75; 0,75]$ с шагом 0,5, $\beta_y \in [-0,75; 0,75]$ с шагом 0,5; всего 64 тестовых примера.

На **рис. 3.4.1—3.4.3** приведены графики действительных значений параметра α_x и значений, определенных с помощью обученной нейронной сети.

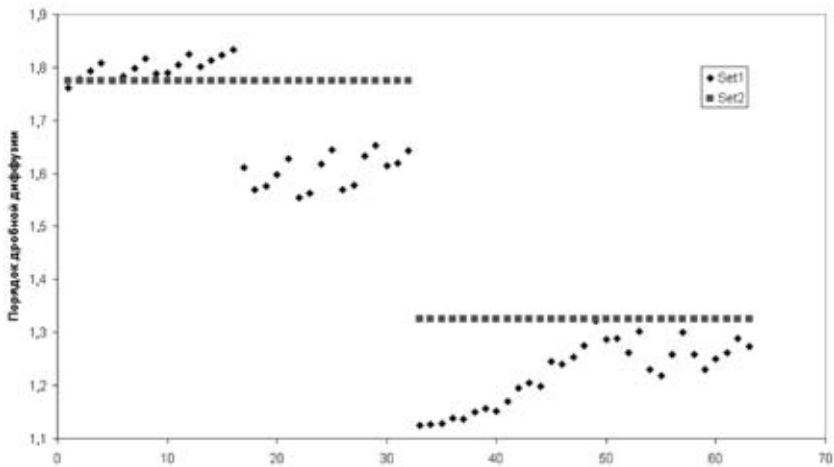


Рис. 3.4.1. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 16 (4×4) входными параметрами (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения). Среднеквадратичная ошибка — 8%.

По оси абсцисс здесь и далее — порядковый номер тестового набора данных

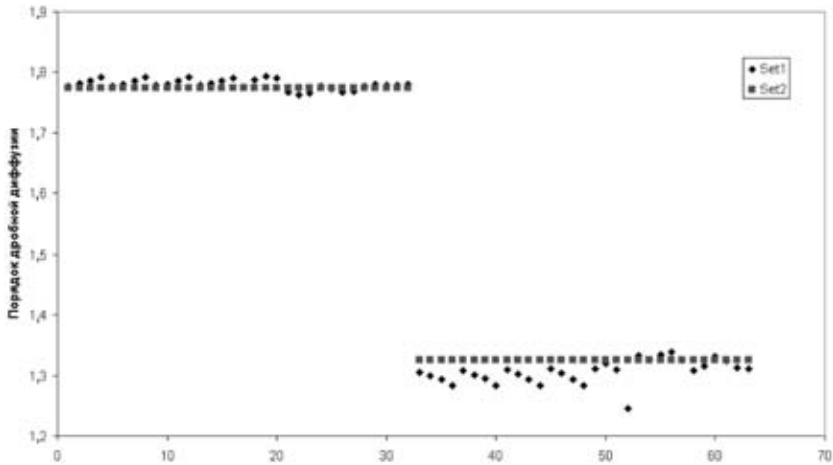


Рис. 3.4.2. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 36 (6×6) входными параметрами (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения). Среднеквадратичная ошибка — 1,5%

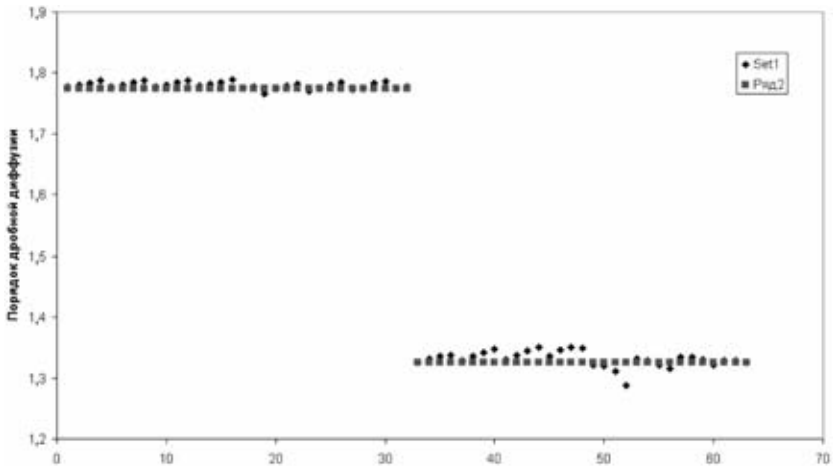


Рис. 3.4.3. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 64 (8×8) входными параметрами (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения). Среднеквадратичная ошибка — 1%

Каждому из двух значений α_x на графике соответствует 32 точки при разных значениях $\alpha_y, \beta_x, \beta_y$. Из графиков видно, что с уменьшением числа входных параметров точность определения параметров дробной диффузии уменьшается. Причем на сетках 6×6 и 8×8 результаты почти одинаковые, а на сетке 4×4 точность падает уже в пять раз. Поэтому далее в этой работе будем использовать нейронные сети с 36 (6×6) входными параметрами (рис. 3.4.4).

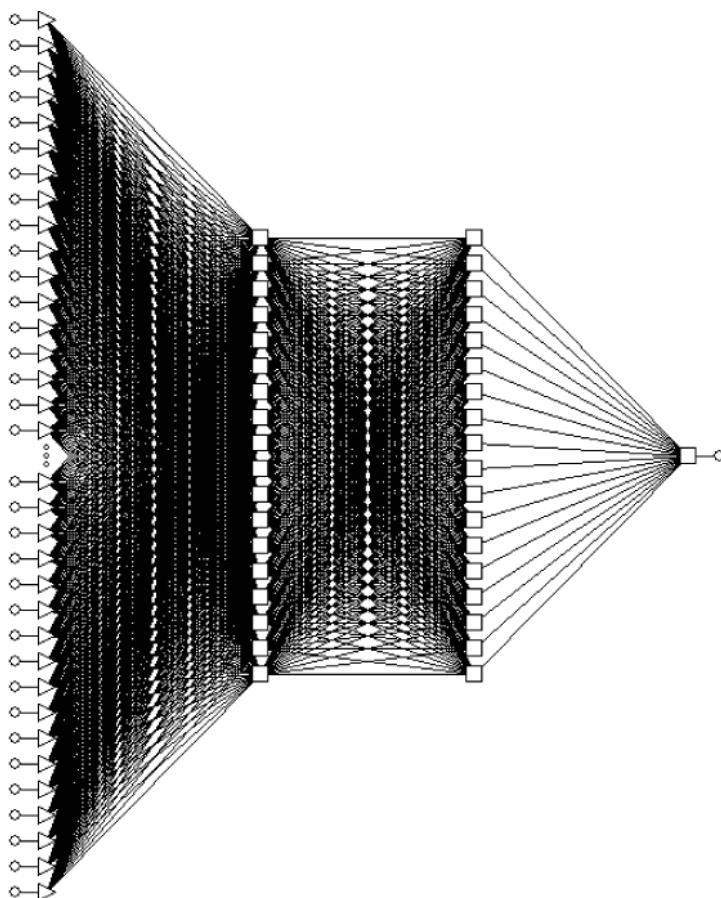


Рис. 3.4.4. Схематический вид нейронной сети с 36 (6×6) входными параметрами. При этом следует заметить, что точность определения параметров дробной диффузии даже на сетке 4×4 меньше 10%. А это уже достаточно хорошая оценка для реальных задач.

3.4.4. Исследование влияния формы профиля концентрации на решение обратной задачи

В связи с введением безразмерного интервала между наблюдаемыми профилями концентрации, характеризуемыми параметром δ из (3.4.4), рассмотрим вопрос о зависимости точности определения параметров дробной диффузии от δ . В качестве примера возьмем нейронную сеть с 36 (агрегированная сеть 6×6) входными параметрами (рис. 3.4.4) и $\delta = 0,01, 0,02, 0,04, 0,08$.

Обучающее множество рассчитывалось при $\alpha_x \in [1,1; 2]$ с шагом 0,45, $\alpha_y \in [1,1; 2]$ с шагом 0,45, $\beta_x \in [-1; 1]$ с шагом 0,5, $\beta_y \in [-1; 1]$ с шагом 0,5; всего 225 обучающих примеров.

Тестовое множество рассчитывалось при $\alpha_x \in [1,325; 1,775]$ с шагом 0,45, $\alpha_y \in [1,325; 1,775]$ с шагом 0,45, $\beta_x \in [-0,75; 0,75]$ с шагом 0,5, $\beta_y \in [-0,75; 0,75]$ с шагом 0,5; всего 64 тестовых примера.

На рис. 3.4.5—3.4.8 приведены графики действительных значений параметра α_x и значений, определенных с помощью обученной нейронной сети.

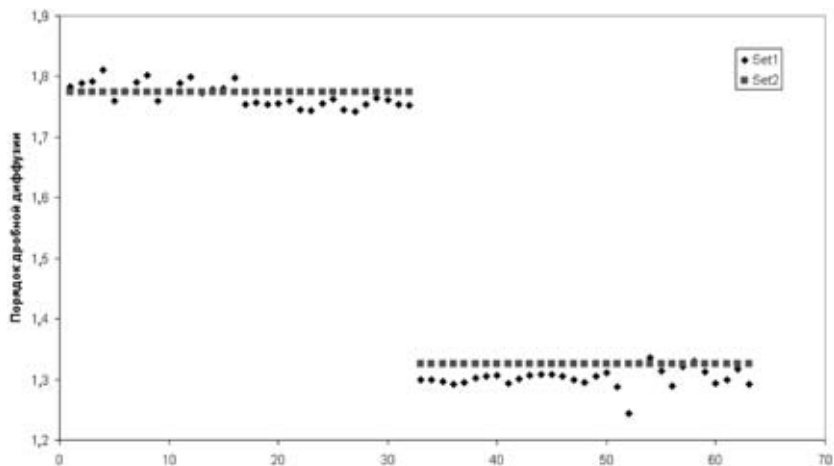


Рис. 3.4.5. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 36 (6×6) входными параметрами, при $\delta = 0,01$ (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения). Среднеквадратичная ошибка — 1,6%

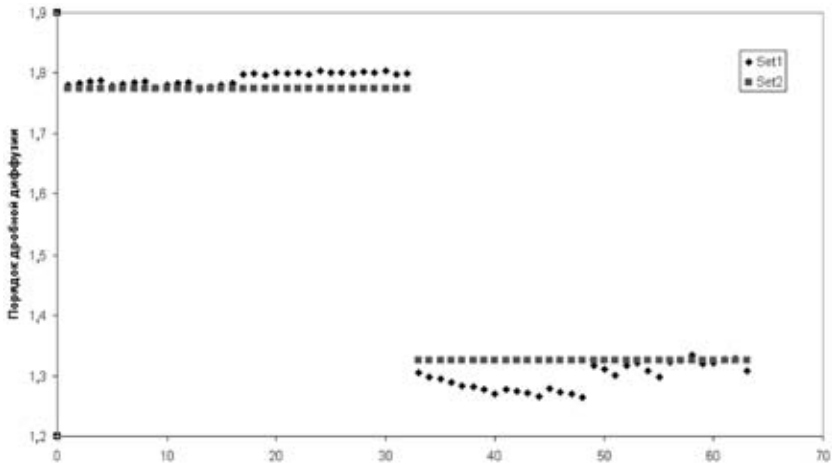


Рис. 3.4.6. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 36 (6×6) входными параметрами, при $\delta = 0,02$ (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения).
Среднеквадратичная ошибка — 1,9%

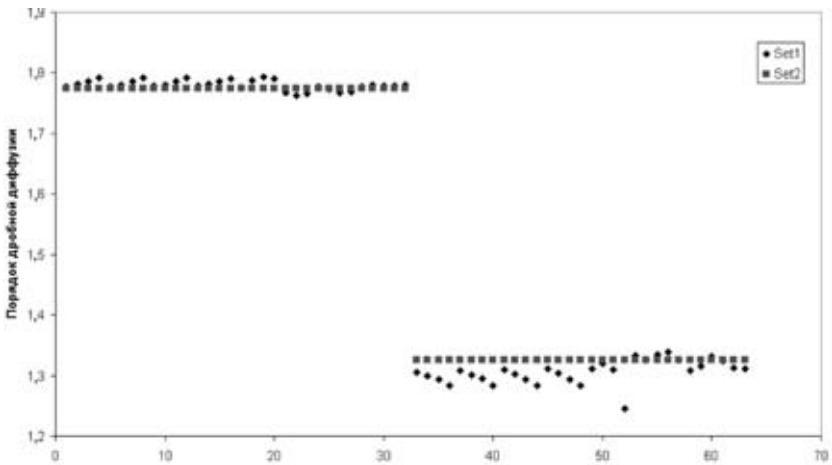


Рис. 3.4.7. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 36 (6×6) входными параметрами, при $\delta = 0,04$ (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения).
Среднеквадратичная ошибка — 1,5%

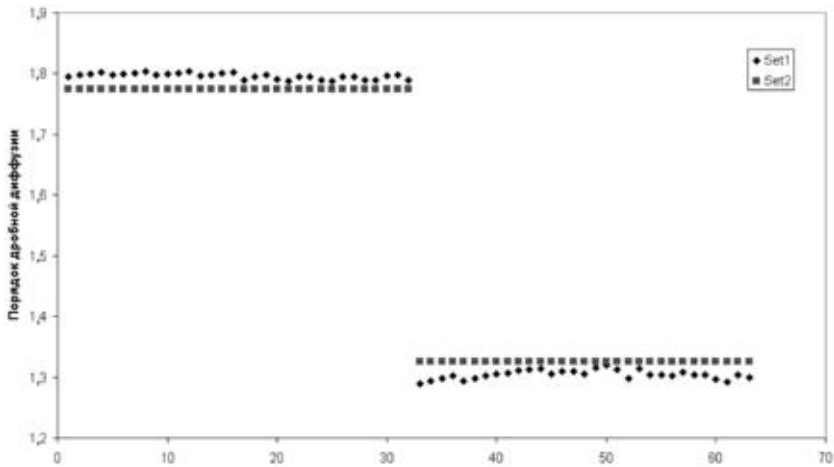


Рис. 3.4.8. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 36 (6×6) входными параметрами, при $\delta = 0,08$ (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения).

Среднеквадратичная ошибка — 1,4%

Каждому из двух значений α_x на графике соответствуют 32 точки при разных значениях $\alpha_y, \beta_x, \beta_y$. Из графиков видно, что в рассматриваемой области значений величина δ не оказывает существенного влияния на точность определения параметров дробной диффузии. Далее для определенности будем рассматривать $\delta = 0,04$.

3.4.5. Исследование влияния количества обучающих примеров на решение обратной задачи

Еще один важный вопрос в случае двумерной задачи — точность определения параметров дробной диффузии в зависимости от количества обучающих примеров. Мы уже рассмотрели определение порядка дробной диффузии α_x при размере обучающего множества в 225 примеров (см. **рис. 3.4.7**). Уменьшим теперь шаг при расчете обучающего множества по параметрам в два раза. При этом размер обучающего множества возрастет в девять раз.

Обучающее множество рассчитывается при $\alpha_x \in [1,1; 2]$ с шагом 0,225, $\alpha_y \in [1,1; 2]$ с шагом 0,225, $\beta_x \in [-1; 1]$ с шагом 0,25, $\beta_y \in [-1; 1]$ с шагом 0,25; всего 2025 обучающих примеров.

Тестовое множество рассчитывается при $\alpha_x \in [1,325; 1,775]$ с шагом 0,225, $\alpha_y \in [1,325; 1,775]$ с шагом 0,225, $\beta_x \in [-0,75; 0,75]$ с шагом 0,25, $\beta_y \in [-0,75; 0,75]$ с шагом 0,25; всего 1024 тестовых примера.

На **рис. 3.4.9** приведены графики действительных значений параметра α_x и значений, определенных с помощью обученной нейронной сети.

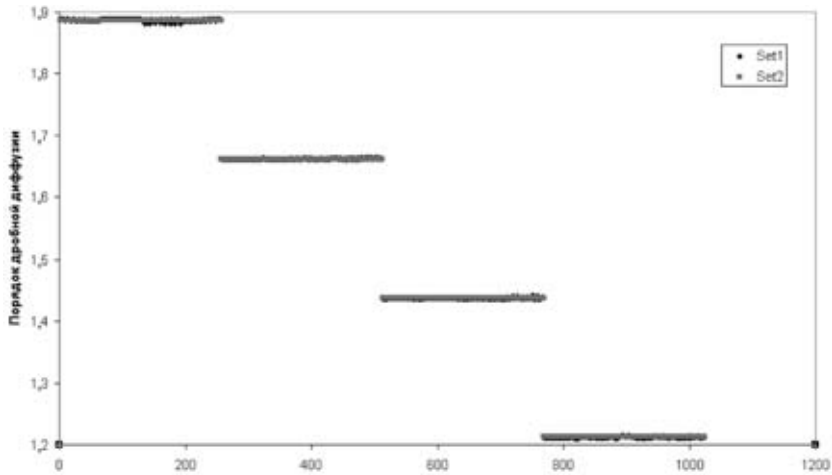


Рис. 3.4.9. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 36 (6×6) входными параметрами (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения). Среднеквадратичная ошибка — 0,06%

Каждому из двух значений α_x на графике соответствует 256 точек при разных значениях $\alpha_y, \beta_x, \beta_y$. Из графика видно, что точность определения порядка дробной диффузии увеличилась на порядок. На **рис. 3.4.10** для сравнения приведены графики действительных значений α_x и значений, определенных с помощью обученной нейронной сети для сети с 16 (агрегированная сеть 4×4) входными параметрами.

В заключение на **рис. 3.4.11** приведены графики действительных значений параметра β_x и значений, определенных с помощью обученной нейронной сети с 36 (агрегированная сеть 6×6) входными параметрами и размером обучающего множества в 441 пример. Из графиков видно, что точность определения коэффициента скошенности такого же порядка, как и точность определения порядка дробной диффузии.

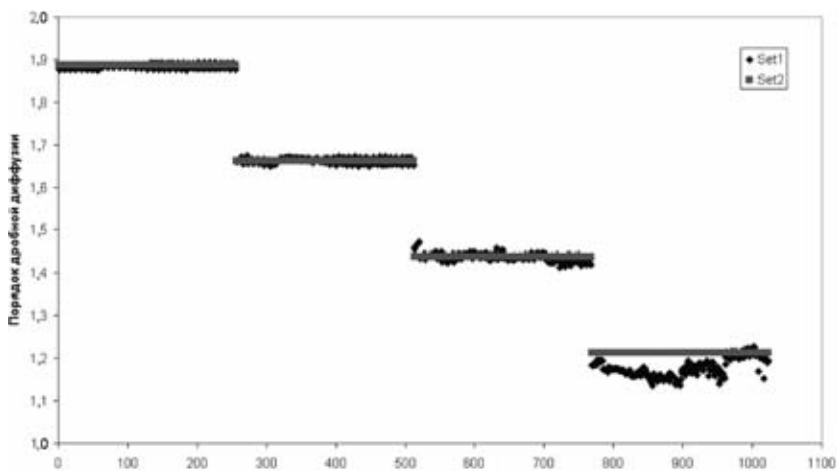


Рис. 3.4.10. Графики действительных значений порядка дробной диффузии и значений, определенных с помощью нейронной сети с 16 (4×4) входными параметрами (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения). Среднеквадратичная ошибка — 2%

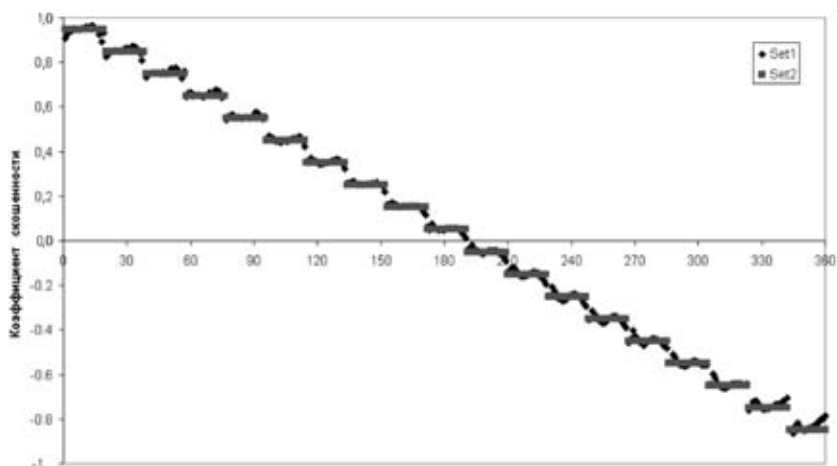


Рис. 3.4.11. Графики действительных значений коэффициента скошенности и значений, определенных с помощью нейронной сети с 36 (6×6) входными параметрами (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения). Среднеквадратичная ошибка — 2%

3.5. Обратная задача по идентификации основных параметров стохастической модели распространения радионуклидов в сильнонеоднородных средах

3.5.1. Одномерный случай

В этом подразделе изучается способность нейронных сетей с различными архитектурами идентифицировать параметры распределений стохастического метода (параметр $\alpha \in [0; 2]$, характеризующий тяжесть хвостов распределений, и фактор асимметрии $\beta \in [0; 1]$) в случае одномерной задачи. Также рассмотрено влияние форм начальных профилей концентрации и числа частиц, участвующих в распределениях, на точность определения указанных параметров.

Постановка обратной задачи. Обратная задача по идентификации параметров распределения примеси в одномерном случае имеет следующую постановку:

- заданы начальное распределение концентрации $C_0(x)$ и распределение концентрации $C_1(x)$ через некоторый интервал времени t_1 (рис. 3.5.1);
- предполагается, что распространение примеси описывается изложенной выше стохастической моделью;
- необходимо определить параметр, характеризующий тяжесть хвостов, и фактор асимметрии распределений.

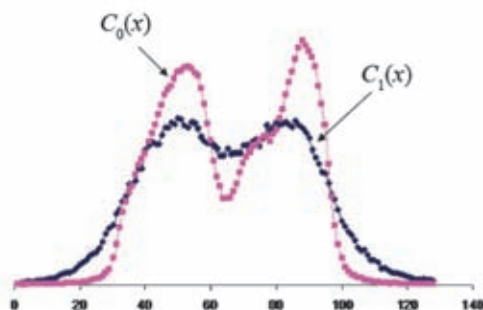


Рис. 3.5.1. Схематический вид начального профиля концентрации $C_0(x)$ и профиля через некоторый момент времени t_1 . По оси абсцисс — номер расчетного узла

Методика решения обратной задачи. В настоящей работе обратная задача по идентификации параметров решалась следующим способом.

- В рамках прямой задачи с начальным распределением $C_0(x)$, временем t_1 рассчитывались обучающее и тестовое множества для разных параметров α и β .
- Для обучения сети на ее вход подавались концентрации, а на выход — соответствующие параметры α или β .
- На вход уже обученной сети подавалась только концентрация из тестового множества. В результате на выходе было получено множество из искомым параметров (α или β).
- Определенные параметры сравнивались (находилась ошибка определения параметров) с соответствующими параметрами из тестового множества.
- В качестве нейронной сети был выбран многослойный перцептрон с двумя скрытыми слоями по 8 нейронов в каждом слое (см. **рис. 3.3.20**). Выходными параметрами нейронной сети являлись параметр α , характеризующий тяжесть хвостов распределений, и фактор асимметрии β .
- Для улучшения процесса обучения и достижения большей точности было предложено разделить задачу. Были построены две одинаковые сети. В одной из них выходным параметром являлся параметр α , а в другой — фактор асимметрии β .
- Что касается входного слоя, то для его формирования можно применить много способов. С одной стороны, чтобы точнее описать весь процесс, нужно взять как можно больше входных параметров, с другой стороны, это сильно затрудняет процесс обучения нейронной сети. Поэтому в настоящей работе было проведено исследование зависимости точности определения параметров от количества элементов входного слоя.

Обучение нейронных сетей проводилось с помощью пакета программ «Neural Networks Toolbox» системы «Matlab» и «STATISTICA Neural Networks». Расчет обучающих и тестовых данных производился на сетке, содержащей 128 точек. Отметим, что для обучения нейронных сетей рассчитывалось еще одно, контрольное множество. Как уже указывалось, цель этого множества — избежать переобучения нейронной сети.

С использованием рассмотренного выше способа были идентифицированы параметры с помощью нейронных сетей. Для этого были рассчитаны обучающее и тестовое множества при следующих значениях параметров:

- обучающее множество: $\alpha \in [0,03; 0,98]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0; 1]$ с шагом 0,05;
- тестовое множество: $\alpha \in [0,07; 0,97]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0,04; 0,99]$ с шагом 0,05.

На **рис. 3.5.2** приведены графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети.

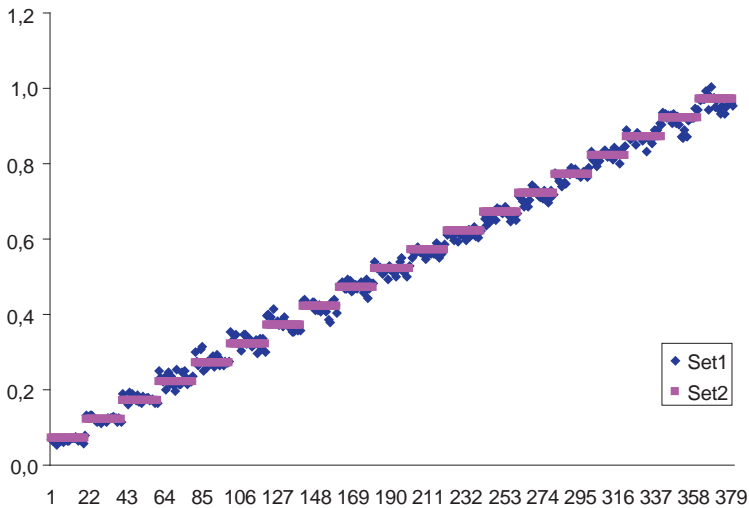


Рис. 3.5.2. График действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

На **рис. 3.5.3** изображены ошибки определения параметра α . Видно, что результаты, полученные с помощью нейронных сетей, являются достаточно точными для параметра α (средняя ошибка определения α равна 0,008, максимальная ошибка определения α равна 0,053). Максимальная ошибка определения параметра возникает при $\alpha = 0,92$. Это значение α и было зафиксировано в дальнейшем при определении параметра β . Была решена прямая задача при следующих значениях параметров:

- обучающее множество: $\alpha = 0,92$, $\beta \in [0; 1]$ с шагом 0,0025; всего 401 обучающий пример;
- тестовое множество: $\alpha = 0,92$, $\beta \in [0,0014; 0,989]$ с шагом 0,0025; всего 400 тестовых примеров.

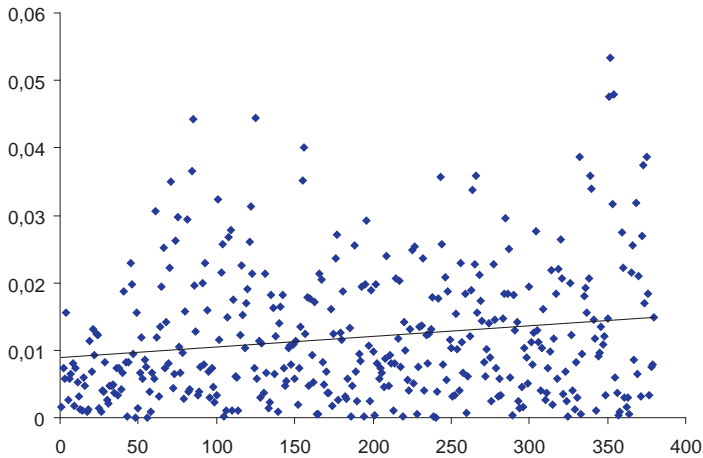


Рис. 3.5.3. График ошибок определения параметра α . Прямой линией обозначена средняя ошибка определения параметра α

На **рис. 3.5.4** приведен график действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети.

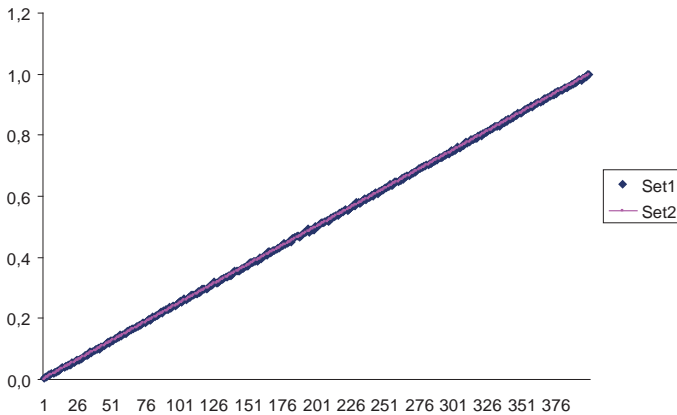


Рис. 3.5.4. График действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Средняя ошибка определения параметра β составила 0,001, максимальная — 0,0075.

Для решения обратной задачи во всем диапазоне изменения параметра α (исключая $\alpha \approx 1$) была решена прямая задача при следующих значениях параметров:

- обучающее множество: $\alpha \in [0,03; 0,93] \cup [1,08; 1,98]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0; 1]$ с шагом 0,05;
- тестовое множество: $\alpha \in [0,07; 0,92] \cup [1,07; 1,97]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0,04; 0,99]$ с шагом 0,05.

На **рис. 3.5.5** приведены графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети, во всем диапазоне изменения α . В этом случае средняя ошибка определения α оказалась равной 0,015 при максимальной ошибке 0,06.

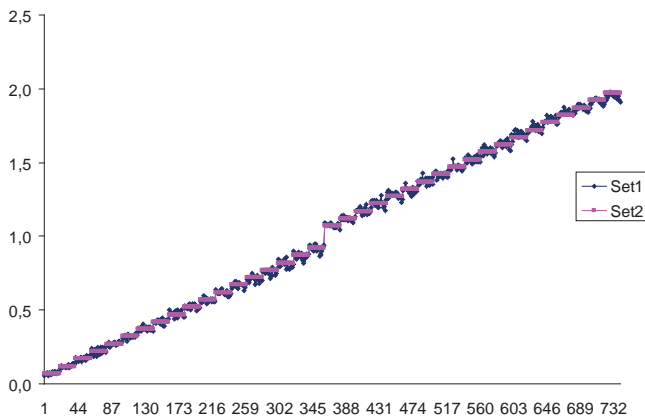


Рис. 3.5.5. График действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Таким образом, ошибки определения параметра α в диапазоне $(0; 1)$ не сильно отличаются от их значений на всем диапазоне изменения α .

Для идентификации параметра β можно зафиксировать любое из этих значений α . Результат будет такой же, как на **рис. 3.5.3**. Средняя ошибка определения параметра β составляет около 0,001.

Из этих результатов можно сделать вывод, что нейронные сети идентифицируют параметры распределений статистического метода очень хорошо.

Исследование различных архитектур нейронных сетей. Выбор архитектуры нейронной сети (многослойный персептрон, описанный в предыду-

щем разделе и изображенный на **рис. 3.3.20**) для определения параметров статистического метода был сделан интуитивно. Такая сеть является достаточно мощной для решения нашей обратной задачи. Возможно, с таким же успехом можно использовать менее мощные нейронные сети, почти не теряя при этом в точности определения параметров. Ниже излагаются результаты исследования различных архитектур нейронных сетей.

Были выбраны следующие нейронные сети:

1. Сеть с линейной функцией активации, состоящая из 1 слоя с 1 нейроном в этом слое. Отметим, что линейные нейронные сети могут решать только линейные задачи (все остальные нейронные сети были нелинейные с логистическими функциями активации).
2. Сеть, состоящая из 1 слоя с 1 нейроном в этом слое.
3. Сеть с 2 нейронами в этом слое.
4. Сеть с 4 нейронами в этом слое.
5. Сеть с 8 нейронами в этом слое
6. Сеть, состоящая из 2 слоев по 2 нейрона в каждом слое.
7. Сеть с 4 нейронами в каждом слое.
8. Сеть с 8 нейронами в каждом слое (эта сеть изображена на **рис. 3.3.20**).

Обучающее множество было получено решением прямой задачи при следующих значениях параметров: $\alpha \in [0,03; 0,98]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0; 1]$ с шагом 0,05; всего 420 обучающих примеров.

Тестовое множество было получено решением той же задачи с параметрами: $\alpha \in [0,07; 0,97]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0,04; 0,99]$ с шагом 0,05; всего 380 тестовых примеров.

На **рис. 3.5.6** приведены графики ошибок определения параметра α для различных архитектур нейронных сетей. Из них видно, что результаты, полученные с помощью линейной нейронной сети, не совсем удовлетворительны: средняя ошибка — 0,21, максимальная ошибка — более 0,4. Что же касается других сетей, то они с хорошим результатом отображают профиль концентрации в используемый нами параметр α : все нелинейные нейронные сети дают максимальную ошибку менее 0,1 при средней ошибке 0,026 и ниже. Далее все исследования в этой работе проводились именно с сетью № 8, показавшей нужный нам результат.

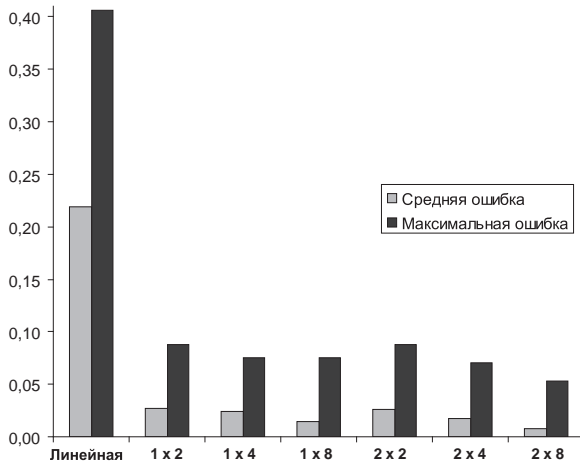


Рис. 3.5.6. Средняя и максимальная ошибки определения параметра, характеризующего тяжесть хвостов, для различных архитектур нейронных сетей

Исследование влияния количества входов нейронной сети. Была решена прямая задача при следующих значениях параметров:

- обучающее множество: $\alpha \in [0,03; 0,9925]$ с шагом 0,0275, $\beta \in [0; 0,99]$ с шагом 0,0275; всего 1332 примера;
- тестовое множество: $\alpha \in [0,07; 0,9775]$ с шагом 0,0275, $\beta \in [0,04; 0,975]$ с шагом 0,0275; всего 1190 примеров.

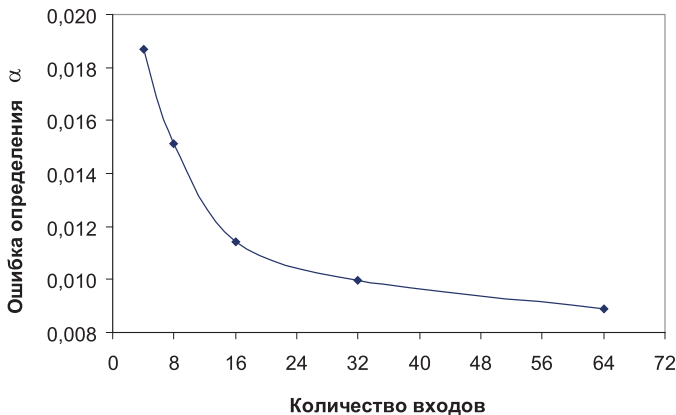


Рис. 3.5.7. График зависимости ошибки определения параметра α от количества входов нейронной сети

Из полученной зависимости (**рис. 3.5.7**) можно сделать вывод, что 16 входов нейронной сети достаточно для определения параметров с ошибкой 0,012. Именно с таким количеством входов нейронной сети и была проведена дальнейшая работа.

Исследование влияния формы профиля концентрации на решение обратной задачи. Было исследовано влияние начальных профилей концентрации на точность определения параметров распределений. Рассматривался профиль, заданный формулой

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma^2}} \exp\left(-\frac{(x-x_0)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (3.5.1)$$

Этот профиль представляет собой два горба (сумму двух гауссианов). При увеличении дисперсии σ два горба сольются в один. Сумма таких распределений Гаусса (с различными значениями $\sigma = 0,3—1,1$) подавалась в качестве начального профиля концентрации (**рис. 3.5.8**).

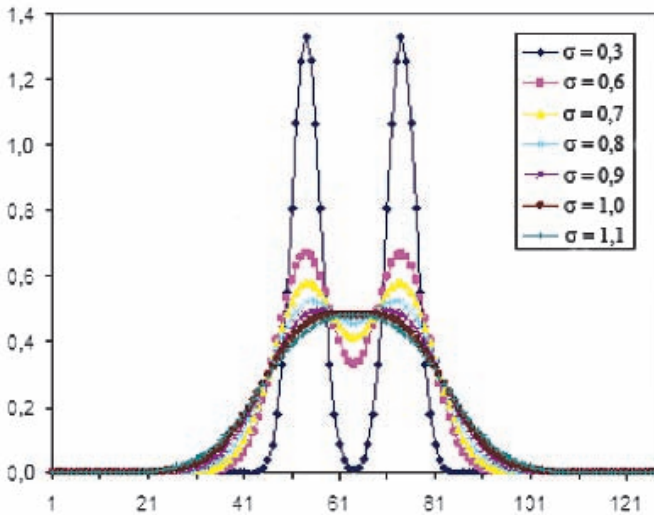


Рис. 3.5.8. Начальные профили концентраций при разных величинах дисперсии σ , использовавшиеся для исследования влияния этих профилей на точность определения параметров распределений

Расчеты были проведены при следующем наборе примеров:

- обучающее множество: $\alpha \in [1, 05; 2]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0; 0, 95]$ с шагом 0,05; всего 400 примеров;

- тестовое множество: $\alpha \in [1,085; 1,935]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0,035; 0,935]$ с шагом 0,05; всего 342 примера.

На **рис. 3.5.9** приведен график зависимости ошибки определения параметра α от величины дисперсии. Из графика видно, что ошибка определения α слабо зависит от формы начального профиля концентрации.

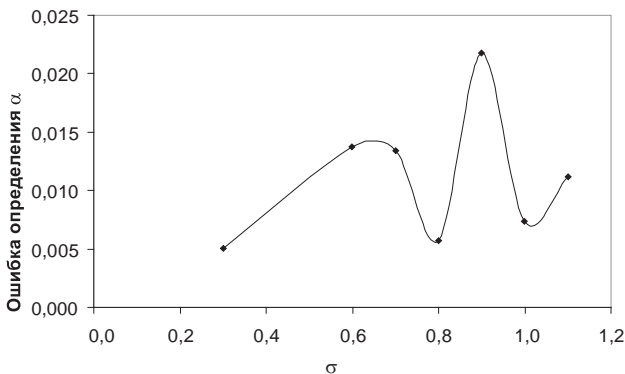


Рис. 3.5.9. График зависимости ошибки определения параметра α от величины σ , характеризующей начальный профиль концентрации

Исследование влияния количества частиц, используемых при решении прямой задачи. Выбор числа частиц, участвующих в распределениях, — также немаловажный вопрос. Если взять мало частиц, профиль концентрации будет выглядеть зашумленным, и параметры распределений определяются с большими ошибками. Большое количество частиц затруднит процесс расчета прямой задачи из-за ограниченности вычислительных ресурсов. Нужен компромисс между гладкостью распределения (точностью определения параметров) и временем расчета прямой задачи.

Для получения зависимости ошибки определения параметра α от количества частиц, используемых при расчете обучающего множества, была решена прямая задача при следующих значениях параметров:

- обучающее множество: $\alpha \in [1,05; 2]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0; 0,95]$ с шагом 0,05; всего 400 обучающих примеров;
- тестовое множество: $\alpha \in [1,085; 1,935]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0,035; 0,935]$ с шагом 0,05; всего 342 тестовых примера.

Такие множества были рассчитаны для 10 000, 50 000, 100 000 и 250 000 частиц. На **рис. 3.5.10** приведен график зависимости ошибки определения α от количества частиц, участвующих в распределении. Можно

сделать вывод, что для решения реальных физических задач (т. е. для достижения точности определения параметра, характеризующего тяжесть хвостов, равную примерно 1%) вполне достаточно 50 000 частиц, участвующих в распределении.

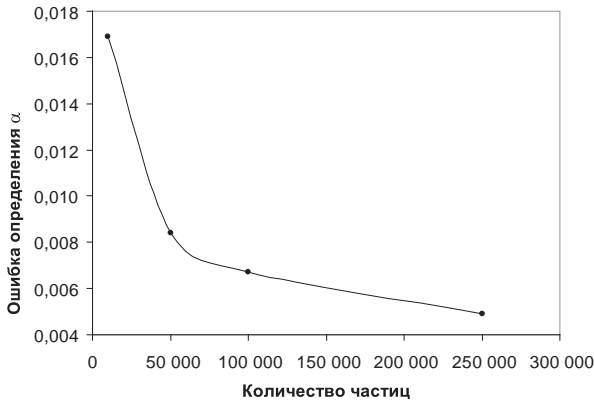


Рис. 3.5.10. График зависимости ошибки определения параметра α от количества частиц, участвующих в распределении

Исследование возможностей нейронных сетей с перекрестными связями. В ходе работы были построены нейронные сети с перекрестными связями в пакете программ «Neural Networks Toolbox» системы «Matlab» и опробованы на пригодность решения нашей обратной задачи. Для идентификации параметров статистического метода была построена нейронная сеть, состоящая из 20 слоев по 1 нейрону в каждом слое, последний слой содержал нейрон с линейной функцией активации, все остальные нейроны были с логистическими функциями активации, количество входов — 16. В этом случае количество связей в сети равно 206 (если n — количество слоев, то количество связей в такой сети составит $16 + \frac{n(n-1)}{2}$). Отметим, что количество связей в многослойном персептроне, изображенном на **рис. 3.3.20**, равно 200.

Для обучения описанной нейронной сети были взяты обучающие и тестовые множества из пункта «Методика решения обратной задачи» данного раздела. Была сделана попытка идентификации параметра α с помощью нейронной сети такого типа. Средняя ошибка определения параметра α составила 0,026 при максимальной ошибке 0,17. График поведения действительных значений α и значений, определенных с помощью нейронной сети с перекрестными связями, приведен на **рис. 3.5.11**.

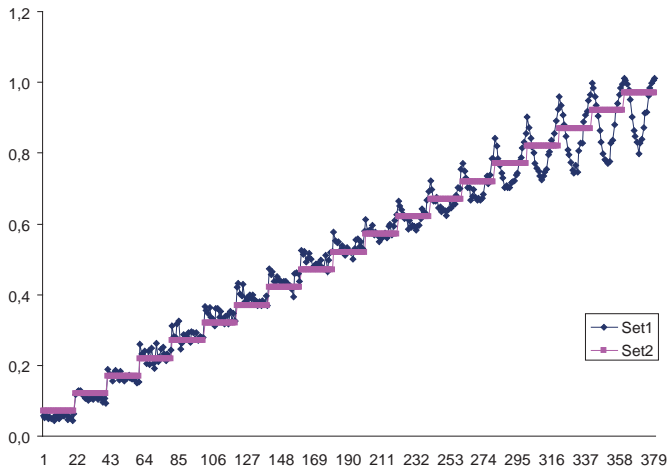


Рис. 3.5.11. График действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети с перекрестными связями (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Эти результаты явно хуже результатов восстановления параметров с помощью многослойного персептрона (ср. **рис. 3.5.12** и **3.5.11**).

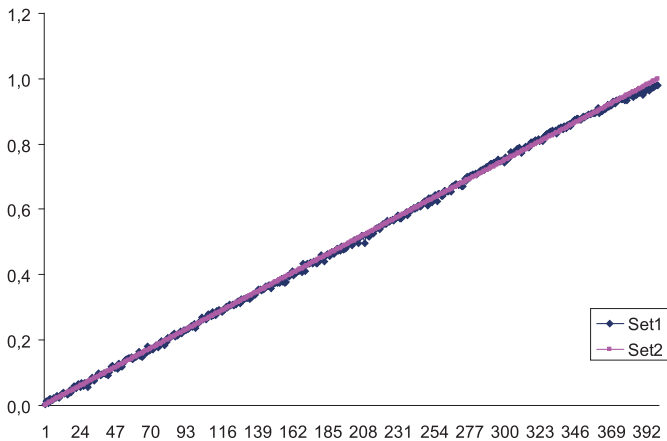


Рис. 3.5.12. График действительных значений параметра β и значений, определенных с помощью нейронной сети с перекрестными связями (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Аналогично была обучена нейронная сеть с перекрестными связями для восстановления параметра β . Результат приведен на **рис. 3.5.12**. В этом случае результаты оказались более приемлемы, но хуже результатов, полученных с помощью многослойного персептрона: средняя ошибка определения β — 0,009 при максимальной ошибке 0,025.

Также была сделана попытка восстановить параметр α во всем диапазоне его изменения ($\alpha \in (0; 1) \cup (1; 2)$). На **рис. 3.5.13** приведены графики действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети с перекрестными связями, во всем диапазоне изменения α . Этот результат намного хуже, чем в случае многослойного персептрона (см. **рис. 3.5.5**).

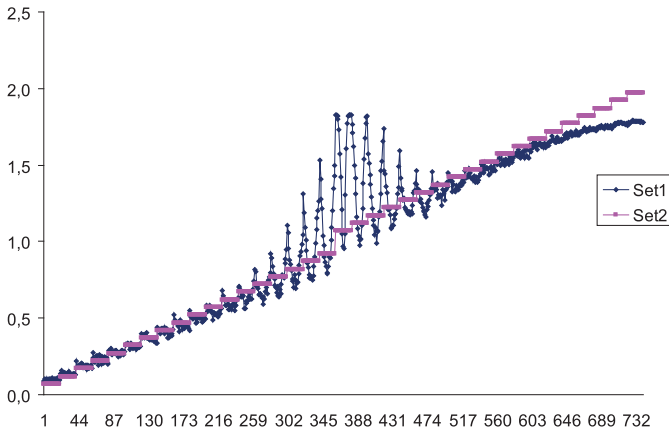


Рис. 3.5.13. График действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети с перекрестными связями (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Также из данных **рис. 3.5.13** можно сделать вывод, что нейронные сети с перекрестными связями не способны идентифицировать параметр α в области $[1,6; 2]$ (в этой области виден хвост, уходящий вниз от точного значения). Чтобы это доказать или опровергнуть, было решено рассчитать обучающее и тестовое множества с помощью прямой задачи при следующих значениях параметров:

- обучающее множество: $\alpha \in [1,6; 2]$ с шагом 0,02, $\beta \in [0; 1]$ с шагом 0,05;
- тестовое множество: $\alpha \in [1,615; 1,995]$ с шагом 0,02, $\beta \in [0,03; 0,98]$ с шагом 0,05.

В результате оказалось, что нейронная сеть с перекрестными связями справляется с такой задачей: средняя ошибка определения параметра α — 0,026 при максимальной ошибке 0,118. Но при таком количестве примеров, содержащихся в обучающем множестве, и наша обычная нейронная сеть (многослойный персептрон) справляется с этой задачей еще лучше (ср. рис. 3.5.14 и 3.5.15).

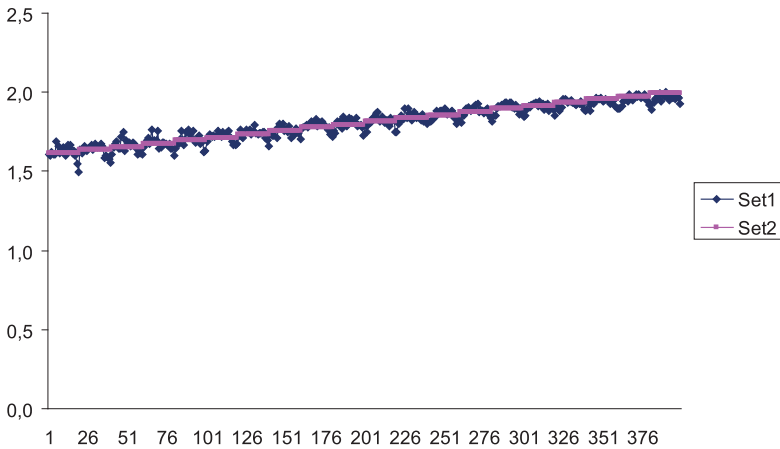


Рис. 3.5.14. График действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети с перекрестными связями (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

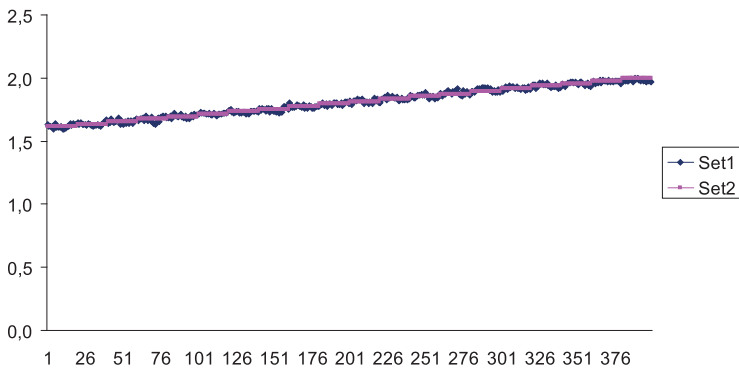


Рис. 3.5.15. График действительных значений параметра α и значений, определенных с помощью нейронной сети (Set1 — значения, определенные с помощью нейронной сети, Set2 — действительные значения)

Таким образом, на данный момент нейронные сети такого типа не оправдали ожиданий, исследования в этой области еще продолжаются. Мы считаем, что по первым результатам не следует делать поспешных выводов о непригодности сетей с перекрестными связями.

3.5.2. Двумерный случай

В данном подразделе изучается способность нейронных сетей с различными архитектурами идентифицировать параметры статистического метода (параметр $\alpha \in [0; 2]$, характеризующий тяжесть хвостов распределений, и фактор асимметрии $\beta \in [0; 1]$) в случае двумерной задачи.

Постановка задачи. Постановка обратной задачи в двумерном случае сводится к следующему. Известен начальный профиль концентрации $C_0(x, y)$ (рис. 3.5.16) и профиль $C_1(x, y)$ (рис. 3.5.17), полученный через некоторое время t_1 . Предполагается, что распространение примеси подчиняется описанной выше стохастической модели. Требуется определить параметры α_x, α_y и факторы асимметрии β_x, β_y .

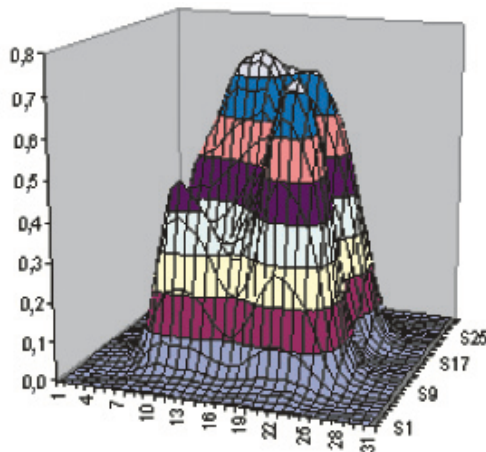
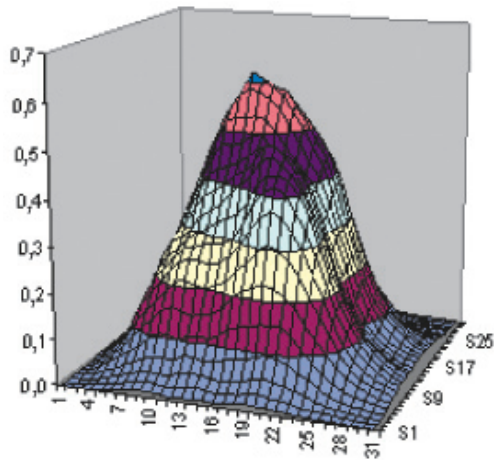


Рис. 3.5.16. Начальный профиль концентрации для двумерной задачи $C_0(x, y)$



Конечный профиль концентрации для двумерной задачи $C_1(x, y)$

Как и во всех других случаях, задачу предлагается решать с использованием искусственных нейронных сетей. Вначале решается прямая стохастическая задача с начальным условием $C_0(x, y)$, заданным временем t_1 и различными парами параметров

$$\left(\alpha_i; \beta_j\right) = \left(1 + \frac{i}{N}; -1 + j \frac{2}{N}\right), \quad i, j = 1, 2, \dots, N.$$

Профиль концентрации задавался на сетке размером 128×128 ячеек. Но стохастический метод работает с частицами, а не с сеточным профилем концентрации. Поэтому первым шагом сеточный профиль концентрации был переведен в набор из 200 000 частиц с заданными координатами. Для уменьшения количества частиц и получения более гладких профилей использовались частицы конечного размера — четыре ячейки расчетной сетки. Прямая задача решалась с шагом по времени 0,005. Всего бралось 10 шагов. После решения прямой задачи набор частиц с полученными новыми координатами преобразовывался обратно к сеточному профилю концентрации. Но 128×128 ячеек — слишком большое количество, чтобы сделать их все входами нейронной сети, поэтому полученные расчетные ячейки следующим шагом были преобразованы к некоторым агрегированным (укрупненным) ячейкам, значения в которых соответствовали средней концентрации по объединяемым мелким ячейкам. Затем полученные таким путем данные используются для обучения нейронной сети. На вход сети подавался вектор из сравнительно небольшого числа агрегированных значений концентрации, а на выход —

искомый параметр α или β . На заключительном этапе на вход сети подавались «реальные» данные, и обученная сеть определяла отвечающие им значения искомых параметров. Для отработки методических вопросов «реальные» данные эмулировались на основе численных расчетов.

Обучение нейронных сетей проводилось с помощью пакетов программ «Neural Networks Toolbox» системы «Matlab» и «STATISTICA Neural Networks». В качестве нейронной сети был выбран многослойный перцептрон с двумя скрытыми слоями по 8 нейронов в каждом слое (см.).

Выходные параметры нейронной сети — параметр, характеризующий тяжесть хвостов распределений, и фактор асимметрии. Для улучшения процесса обучения и достижения большей точности было предложено разделить задачу, т. е. были построены четыре одинаковые сети. В каждой из них определялся один из четырех искомых параметров $\alpha_x, \alpha_y, \beta_x, \beta_y$.

С применением рассмотренного выше способа были идентифицированы параметры с помощью нейронных сетей. Для этого были рассчитаны обучающее и тестовое множества при следующих значениях параметров:

- обучающее множество: $\alpha \in [1, 1; 1, 9]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0; 1]$ с шагом 0,05;
- тестовое множество: $\alpha \in [1, 15; 1, 85]$ с шагом 0,05, $\beta \in [0, 05; 0, 95]$ с шагом 0,05.

На приведен график ошибок определения параметра α для различных тестовых примеров. Из него видно, что результаты, полученные с помощью нейронных сетей, достаточно точны для определения параметра α (средняя ошибка определения α — 0,01, максимальная ошибка определения α — 0,045). Можно сделать вывод, что нейронные сети идентифицируют параметры распределений стохастического метода достаточно точно.

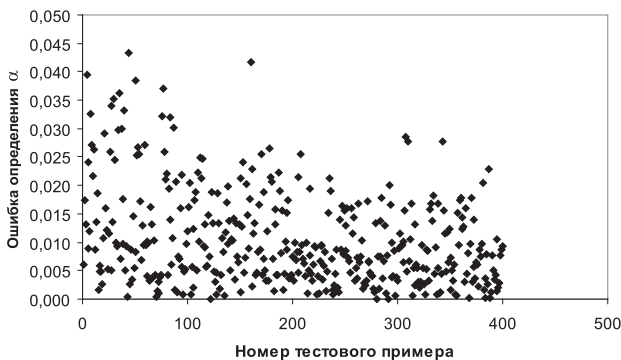


Рис. 3.5.18. Ошибки определения параметра α

Исследование различных архитектур нейронных сетей. Были рассмотрены:

1. Линейная сеть с 64 входами и 1 выходом.
2. $64 \times 1 \times 1$ — нейронная сеть с 64 входами, 1 нейроном в скрытом слое и 1 выходом.
3. $64 \times 2 \times 1$ — нейронная сеть с 64 входами, 2 нейронами в скрытом слое и 1 выходом.
4. $64 \times 4 \times 1$ — нейронная сеть с 64 входами, 4 нейронами в скрытом слое и 1 выходом.
5. $64 \times 8 \times 1$ — нейронная сеть с 64 входами, 8 нейронами в скрытом слое и 1 выходом.
6. $64 \times 4 \times 4 \times 1$ — нейронная сеть с 64 входами, 4 нейронами в двух скрытых слоях и 1 выходом.
7. $64 \times 8 \times 8 \times 1$ — нейронная сеть с 64 входами, 8 нейронами в двух скрытых слоях и 1 выходом.

На **рис. 3.5.19** показаны средняя и максимальная ошибки определения параметра α для сетей с различной архитектурой. Эти данные показывают, что для решения поставленной задачи достаточно нейронной сети с одним скрытым слоем и двумя нейронами.

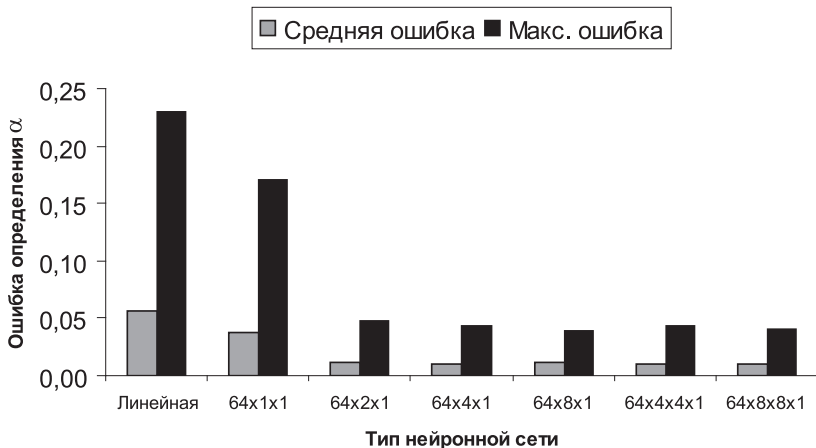


Рис. 3.5.19. Ошибка определения параметра α для различных архитектур нейронных сетей

Исследование влияния количества входов нейронной сети. Еще один вопрос, касающийся архитектуры нейронной сети, — это количество входных параметров. Время процесса обучения нейронной сети очень сильно зависит от количества входных параметров. Чем больше входных пара-

метров, тем время обучения больше. В связи с этим сделать все ячейки расчетной сетки входными параметрами не представляется возможным. Для определения необходимого количества входных параметров нейронной сети были проведены исследования при различном их количестве. Результаты приведены на **рис. 3.5.20**. Из него видно, что для решения поставленной задачи достаточно 16 входных параметров.

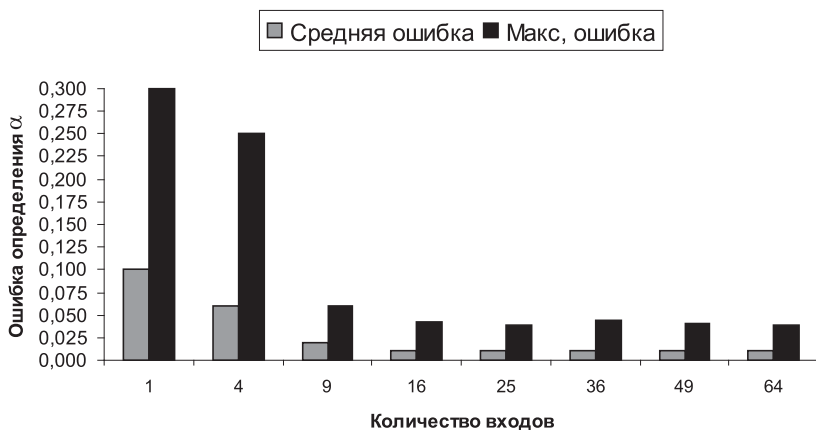


Рис. 3.5.20. Ошибка определения параметра α для различного количества входов нейронной сети

Таким образом, для решения обратной задачи по определению параметров распространения примеси в сильнонеоднородных средах в двумерном случае достаточно нейронной сети, представленной на **рис. 3.5.21**.

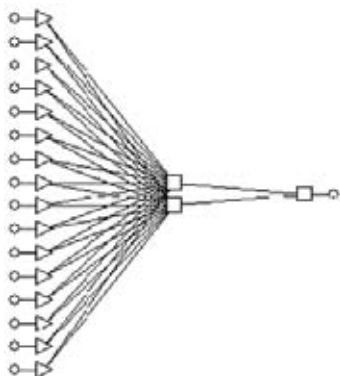


Рис. 3.5.21. Самая простая архитектура нейронной сети для решения двумерной задачи

Литература

1. Беркинблит М. Б. Нейронные сети. — М.: МИРОС, 1993.
2. Уоссерман Ф. Нейрокомпьютерная техника. — М.: Мир, 1992.
3. Мишулина О. А., Лабинская А. А., Щербина М. В. Лабораторный практикум по курсу «Введение в теорию нейронных сетей». — М.: МИФИ, 2000. — 204 с.
4. Омату С., Халид М., Юсоф Р. Нейроуправление и его приложения. — М.: ИПРЖРБ, 2000. — 272 с.
5. Rumelhart D. E., Hinton G. E., Williams R. J. Learning representations by backpropagation errors // *Nature*. — 1986. — Vol. 323. — P. 533—536.
6. Vogl T. P., Mangis J. K. et al. Accelerating the convergence of the back-propagation method // *Biological Cybernetics*. — 1988. — Vol. 59. — P. 256—264.
7. Головки В. А. Нейронные сети: обучение, организация и применение: Кн. 4. — М.: ИПРЖР, 2001. — 78 с.
8. Golovko V., Savitskiy Ju., Gladischuk V. Neural Nets Training Algorithms for Pattern Recognition and Prediction // *Proceeding Int. Conf. on Pattern Recognition*. — Szczecin [Poland]: Technical Univ., 1995. — P. 167—171.

Научное издание

*Головизнин Василий Михайлович,
Кондратенко Петр Сергеевич,
Короткин Иван Александрович,
Драников Илья Леонидович,
Матвеев Леонид Владимирович*

**АНОМАЛЬНАЯ ДИФфуЗИЯ РАДИОНУКЛИДОВ
В СИЛЬНОНЕОДНОРОДНЫХ ГЕОЛОГИЧЕСКИХ
ФОРМАЦИЯХ**

Под редакцией члена-корреспондента РАН
Л. А. Большова

*Утверждено к печати Ученым советом
Института проблем безопасного развития атомной энергетики
Российской академии наук*

Редактор *А. И. Иоффе*

Издательство «Наука»
117997, Москва, Профсоюзная ул., 90
Зав. редакцией *Г. И. Чертова*

Оригинал-макет подготовлен ООО «Комтехпринт»
Иллюстрации приведены в авторской редакции

Формат 60x90 ¹/₁₆. Бумага офсетная 80 г/м²
Печать офсетная. Гарнитура «Оффицина»
Усл. печ. л. 21,5. Уч.-изд. л. 19,5. Заказ 20919

Заказное

Отпечатано с готовых диапозитивов типографией ООО «Инфолио-Принт»