МЕХАНИКА
ЖИДКОСТИ И ГАЗА
№ 5 • 2004

УДК 532.546

© 2004 г. Б. Х. ХУЖАЁРОВ

МАКРОСКОПИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ РЕЛАКСАЦИОННОГО ПЕРЕНОСА ВЕЩЕСТВА В ПОРИСТОЙ СРЕДЕ

Рассмотрен вопрос макроскопического моделирования движения вязкой жидкости и переноса вещества в пористой среде, когда в локальном масштабе перенос вещества описывается релаксационным законом Фика. Исследованы несколько случаев, определяемых значениями локального числа релакса массового потока вещества и числа Пекле. Даны анализ полученных макроскопических моделей переноса вещества и их сравнение с известными феноменологическими моделями.

Ключевые слова: гидродинамическая дисперсия, гомогенизация, диффузия, конвекция, макроскопическое моделирование.

При переносе пассивных примесей в пористой среде профили концентрации могут иметь негауссовский характер с проявлением заметных хвостовых эффектов [1–3], что указывает на нарушение классического закона Фика. Одним из первых подходов к моделированию нефиковского характера диффузии веществ в пористой среде, по-видимому, была автокорреляционная теория [4]. Феноменологические модели аномальной (нефиковской) диффузии и гидродинамической дисперсии в целом разрабатываются с сравнительно недавнего времени. В [5] массовый поток вещества дается уравнением, содержащим два члена – классический фиковский диффузионный и релаксационный. Совместно с уравнением баланса массы вещества это уравнение образует систему четырех уравнений с частными производными первого порядка для определения трех компонент дисперсионной массовой скорости и концентрации. Система уравнений относится к гиперболическому типу, и, следовательно, концентрационные профили распространяются с конечной скоростью. Роль нефиковского члена уменьшается с увеличением времени, и модель переходит к классическому закону Фика. Обобщенная нефиковская теория дисперсии вещества в пористой среде предложена в [6]. Выведено общее уравнение, из которого в частных случаях получаются уравнения, содержащие различные производные по времени массового дисперсионного потока, а также стохастические модели [7, 8], описываемые интегродифференциальными уравнениями, в которых тензор дисперсии растет асимптотически по времени и по пространственной координате.

В настоящей работе на основе нефиковской модели [5] выводятся макроскопические уравнения переноса вещества в пористой среде. Сначала течение жидкости и релаксационный перенос вещества описаны в локальном масштабе. Затем с применением метода гомогенизации для различных значений локальных безразмерных чисел релаксации потока вещества и Пекле выведены макроскопические уравнения. Проанализирована роль нефиковских эффектов в макроскопическом переносе вещества в пористой среде. При определенных условиях в конвективно-диффузионных процессах для потоков в трубах и каналах получаются гиперболические модели [9, 10]. В отдельных случаях, определяемых безразмерными числами релаксации потока вещества и Пекле, здесь также получены гиперболические модели макроскопического переноса вещества.

1. Дадим постановку локальной задачи движения жидкости и переноса вещества. Рассмотрим элемент пористой среды Ω, поровый объем которого обозначим через Ω_p, а твердую матрицу (скелет) – Ω_s: $\Omega = \Omega_p \cup \Omega_s$. Границу между областями Ω_p и Ω_s обозначим через Γ. По определению $\Gamma = \Omega \cap \Omega_p \cap \Omega_s$. Пористая среда рассматривается как периодическая структура или как однородная случайная среда, где четко можно выделить представительный элементарный объем Ω, в котором поставим локальную задачу движения жидкости и переноса вещества.

Пусть поровый объем среды полностью заполнен несжимаемой вязкой жидкостью с вязкостью μ. Считаем, что $\mathrm{Re} \ll 1$, где число Рейнольдса может определяться как $\mathrm{Re} = Ud\rho/\mu$, U – характерная скорость течения жидкости, d – характерный диаметр пор, ρ – плотность жидкости, так что течение будет описываться квазистационарным уравнением Стокса и уравнением неразрывности

$$\mu\nabla^2\mathbf{v} - \nabla p = 0, \quad \nabla\mathbf{v} = 0 \tag{1.1}$$

где $\mathbf{v}$ – скорость жидкости в поровом пространстве, p – давление.

На границе Γ принимается условие прилипания $\mathbf{v} = 0$, $\mathbf{x} \in \Gamma$.

Перенос растворенного в жидкости вещества в пористой среде осуществляется за счет конвекции и диффузии. Диффузия происходит по нефиковскому релаксационному закону [5]. Тогда уравнение конвективно-диффузионного переноса запишем в виде

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}c) + \nabla\mathbf{q} = 0 \tag{1.2}$$

$$\mathbf{q} = -\mathbf{D}\nabla c - \mathbf{a}\frac{\partial\mathbf{q}}{\partial t} \tag{1.3}$$

где c – массовая концентрация вещества, $\mathbf{q}$ – массовый поток вещества через единичную площадь, $\mathbf{D}$ – тензор молекулярной диффузии, $\mathbf{a}$ – тензор релаксации массового потока вещества, t – время.

Пусть растворенное вещество в скелет пористой среды не абсорбируется

$$\mathbf{nq} = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma \tag{1.4}$$

где $\mathbf{n}$ – единичный вектор, нормальный Γ.

В задаче (1.2)–(1.4) для удобства дальнейших рассуждений считаем, что тензор $\mathbf{a}$ является изотропным $\mathbf{a} = a\mathbf{I}$, $a = \mathrm{const}$, где $\mathbf{I}$ – единичный тензор.

Тогда из (1.3) получаем

$$\left(1 + a\frac{\partial}{\partial t}\right)\mathbf{q} = -\mathbf{D}\nabla c \tag{1.5}$$

Используя (1.5), уравнение (1.2) можно записать в виде

$$\left(1 + a\frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c) \tag{1.6}$$

Решение (1.5) относительно $\mathbf{q}$ при условии $\mathbf{q}(t = 0) = 0$ имеет вид

$$\mathbf{q} = -\frac{1}{a}\int_0^t \mathbf{D}\nabla c e^{-(1-\xi)/a} d\xi \tag{1.7}$$

Для дальнейших рассуждений условие $\mathbf{q}(t = 0) = 0$ особого значения не имеет, вместо него можно взять любые неоднородные условия.

Учитывая (1.7), условие (1.4) для всех t можно записать в виде

$$\mathbf{nD}\nabla c = 0, \quad \mathbf{x} \in \Gamma \tag{1.8}$$

Уравнение (1.6) имеет три характерных времени: $T_a = a$ – характерное время релаксационных эффектов; $T_f = L/U$ – характерное время конвективного переноса (L – характерная длина пористой среды), $T_d = L^2/D$ – характерное время диффузии (D – характерное значение $\mathbf{D}$).

Используя приведенные выше характерные времена, можно построить различные безразмерные уравнения переноса вещества. Обозначая через T_{ch} характерное время процесса переноса вещества, уравнение (1.6) запишем в безразмерном виде

$$\left(1 + M\frac{\partial}{\partial t}\right)\left[N\frac{\partial c}{\partial t} + \mathrm{Pe}\,\nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c)$$
$$M = \frac{T_a}{T_{ch}}, \quad N = \frac{T_d}{T_{ch}}, \quad \mathrm{Pe} = \frac{T_d}{T_f} \tag{1.9}$$

где для удобства записи за безразмерными величинами сохранены обозначения соответствующих размерных величин и безразмерная концентрация определяется относительно некоторой характерной концентрации.

Если в качестве T_{ch} выбрать T_d, то $M = \mathrm{Pa} = T_a/T_d$, $N = 1$ и из (1.9) получим

$$\left(1 + \mathrm{Pa}\frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t} + \mathrm{Pe}\,\nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c) \tag{1.10}$$

Безразмерное число Pa назовем числом релаксации потока вещества, а Pe – число Пекле.

Если в качестве T_{ch} выбрать T_f, безразмерные числа в (1.9) принимают вид $M = \mathrm{PaPe}$, $N = T_d/T_f = \mathrm{Pe}$, что дает

$$\left(1 + \mathrm{PaPe}\frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}c)\right] = \frac{1}{\mathrm{Pe}}\nabla(\mathbf{D}\nabla c) \tag{1.11}$$

Аналогичным образом (1.1) может быть приведено к безразмерному виду.

2. Используя приведенное выше локальное описание задачи, получим макроскопическое описание течения жидкости и переноса вещества. Такая процедура получила название "гомогенизация". Общие принципы метода гомогенизации разработаны в [11–13]. Для задач конвективно-диффузионного переноса веществ в пористой среде метод гомогенизации применен в [14–21].

Пусть представительный элементарный объем имеет характерный размер l. Пористая среда состоит из достаточно большого количества таких объемов, так что можно говорить о разделении масштабов $\varepsilon = l/L \ll 1$. Условие $\varepsilon \ll 1$ является фундаментальным положением метода гомогенизации. Две характерные длины, l и L, позволяют ввести две пространственные переменные $\mathbf{x}/l$ и $\mathbf{x}/L$, где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ – физическая пространственная координата. Вследствие разделения масштабов все неизвестные функции задачи являются, помимо других переменных, функциями $\mathbf{x}/l$ и $\mathbf{x}/L$. На практике удобно ввести две независимые безразмерные пространственные переменные, т.е. $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y} = \mathbf{x}\varepsilon$, где $\mathbf{x}$ – макроскопическая (медленная) пространственная переменная, а $\mathbf{y}$ – микроскопическая (быстрая) пространственная переменная. Тогда можно использовать два эквивалентных описания [22]: – макроскопическое $\Phi = \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $\mathbf{y} = \mathbf{x}/\varepsilon$; – микроскопическое $\Phi = \Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, $\mathbf{x} = \varepsilon\mathbf{y}$, где Φ – используемая в задаче функция.

Используя условие $\varepsilon \ll 1$, функцию Φ представляем в виде асимптотического разложения по степеням ε

$$\Phi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Phi^{(0)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon\Phi^{(1)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \varepsilon^2\Phi^{(2)}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \ldots \tag{2.1}$$

Периодичность пористой среды сводится к $\mathbf{y}$ – периодичности функций $\Phi^{(i)}$, $i = 0, 1, \ldots$. Если неизвестные функции задачи можно представить в виде (2.1), тогда задача может быть гомогенизирована, иначе – нет.

Задачи (1.1) и (1.2), (1.3), (1.8) независимы друг от друга, поэтому они могут быть решены раздельно. Решение задачи (1.1) хорошо известно. Главный результат [15]

$$\begin{gathered}
\langle \mathbf{v}_0 \rangle = -\mathbf{K}\nabla_x p_0, \quad \mathbf{K} = \frac{1}{\Omega}\int\limits_{\Omega_p} \mathbf{k}\, d\Omega \\
\mathbf{v}_0 = -\mathbf{k}(\mathbf{y})\nabla_x p_0, \quad p_1 = -\mathbf{b}(\mathbf{y})\nabla_x p_0 + \bar{p}_1(\mathbf{x}) \\
\langle \mathbf{b} \rangle_p = 0, \quad \langle A \rangle_p = \frac{1}{\Omega_p}\int\limits_{\Omega_p} A\, d\Omega, \quad \langle A \rangle = \frac{1}{\Omega}\int\limits_{\Omega_p} A\, d\Omega
\end{gathered} \tag{2.2}$$

где $\mathbf{v}_0$, p_0 – первые члены разложений в ряд (2.1) функций $\mathbf{v}$, p соответственно, ∇_x – градиентный оператор по медленной переменной $\mathbf{x}$, $\mathbf{b}(\mathbf{y})$ – вектор-функция, $\bar{p}_1(\mathbf{x})$ – произвольная функция, $\mathbf{k}$ – решение локальной задачи

$$\nabla_y^2 \mathbf{k} + \mathbf{I} + \nabla_y \mathbf{b} = 0, \quad \nabla_y \mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{k} = 0, \quad \mathbf{y} \in \Gamma$$

∇_y – градиентный оператор по быстрой переменной $\mathbf{y}$.

Макроскопическая скорость $\mathbf{v}_0$ удовлетворяет уравнению неразрывности $\nabla_x \langle \mathbf{v}_0 \rangle = 0$, что с учетом (2.2) дает

$$\nabla_x (\mathbf{K}\nabla_x p_0) = 0$$

При выводе (2.2) используются следующие уравнения:

$$\nabla_y \mathbf{v}_0 = 0, \quad \nabla_x \mathbf{v}_0 + \nabla_y \mathbf{v}_1 = 0 \tag{2.3}$$

которые получаются при асимптотическом разложении задачи (1.1).

Наряду с временем t, связанным с масштабом характерного времени диффузии, введем еще два времени: $\eta = t\mathrm{Pa}$, $\tau = t\mathrm{Pe}$, связанных соответственно характерными временами релаксации потока вещества и конвективного переноса. Произвольная функция задачи в общем случае рассматривается как функция $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$, t, η, τ. Соответственно при применении метода гомогенизации в общем случае необходимо использовать следующее правило дифференцирования по времени:

$$\begin{gathered}
\frac{\partial}{\partial t} \Rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + \mathrm{Pa}\frac{\partial}{\partial \eta} + \mathrm{Pe}\frac{\partial}{\partial \tau} \\
\frac{\partial^2}{\partial t^2} \Rightarrow \frac{\partial^2}{\partial t^2} + 2\mathrm{Pa}\frac{\partial^2}{\partial t \partial \eta} + 2\mathrm{Pe}\frac{\partial^2}{\partial t \partial \tau} + 2\mathrm{Pa}\mathrm{Pe}\frac{\partial^2}{\partial \eta \partial \tau} + \mathrm{Pa}^2\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \mathrm{Pe}^2\frac{\partial^2}{\partial \tau^2}
\end{gathered} \tag{2.4}$$

В (2.4), если характерные времена релаксации потока вещества и конвекции эквивалентны характерному диффузионному времени, достаточно использовать обычное правило дифференцирования $\partial/\partial t$.

3. Далее рассмотрим несколько случаев, определяемых порядком величин Pa, Pe относительно ε. Случаи Pa, Pe = $O(\varepsilon^m)$, $m \geq 2$, не рассматриваются, так как в этих случаях в макроскопических уравнениях влияние Pa и Pe не будет ощущаться. В процессе гомогенизации используем макроскопическое описание [22].

Случай 1. Pa = $O(\varepsilon)$, Pe = $O(\varepsilon)$. Здесь и далее в уравнениях переноса вещества в локальном масштабе непосредственно будем учитывать порядок чисел Pa, Pe. Правило дифференцирования по времени в данном случае не изменяется. В качестве характерного времени процесса используем T_d.

Уравнение (1.10) имеет вид

$$\left(1+\varepsilon\frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t}+\varepsilon\nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c) \tag{3.1}$$

Используем следующее асимптотическое разложение (в общем случае):

$$c = c_0(\mathbf{x},\mathbf{y},t,\eta,\tau)+\varepsilon c_1(\mathbf{x},\mathbf{y},t,\eta,\tau)+\varepsilon^2 c_2(\mathbf{x},\mathbf{y},t,\eta,\tau)+\ldots \tag{3.2}$$

Правило дифференцирования по пространственной переменной в связи с независимостью **x** и **y** принимает вид

$$\nabla\cdot = \nabla_x\cdot+\frac{1}{\varepsilon}\nabla_y\cdot \tag{3.3}$$

Подставляя (3.2) в (3.1) с учетом (3.3) и приравнивания коэффициенты при одинаковых степенях ε, получаем бесконечную цепочку уравнений относительно $\mathbf{v}_i$ и c_i, $i = 0, 1, \ldots$. Получаемые уравнения при этом не отличаются от соответствующих уравнений [15]. Таким образом, в этом случае релаксационные эффекты в законе диффузии в рамках принятой точности не проявляются в макроскопических законах, а имеют только локальный характер.

Случай 2. $\mathrm{Pa} = O(1)$, $\mathrm{Pe} = O(\varepsilon)$. Уравнение (1.10) становится

$$\left(1+\frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t}+\varepsilon\nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c) \tag{3.4}$$

Задача при ε^{-2} в асимптотическом разложении (3.4) и граничного условия (1.8) имеет вид

$$\nabla_y(\mathbf{D}\nabla_y c_0) = 0;\quad \mathbf{nD}\nabla_y c_0 = 0,\quad \mathbf{y}\in\Gamma \tag{3.5}$$

из которой получаем $c_0 = c_0(\mathbf{x}, t)$.

Задача при ε^{-1} в асимптотическом разложении (3.4) с учетом (3.5) имеет вид

$$\nabla_y[\mathbf{D}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1)] = 0;\quad \mathbf{nD}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1) = 0,\quad \mathbf{y}\in\Gamma \tag{3.6}$$

В [15] при макроскопическом моделировании переноса вещества в пористой среде без учета релаксационных эффектов была получена аналогичная (3.6) задача. Уравнение (3.6) показывает, что c_1 является линейной функцией $\nabla_x c_0$

$$c_1 = \chi(\mathbf{y})\nabla_x c_0+\bar{c}_1(\mathbf{x},t) \tag{3.7}$$

где χ – периодическая в представительном элементарном объеме функция с $\langle\chi\rangle_p = 0$, $\bar{c}_1(\mathbf{x}, t)$ – произвольная функция.

Подстановка (3.7) в (3.6) приводит к следующей локальной задаче для определения χ:

$$\nabla_y[\mathbf{D}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi)] = 0;\quad \mathbf{nD}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi) = 0,\quad \mathbf{y}\in\Gamma \tag{3.8}$$

Задача при ε^0 в асимптотическом разложении имеет вид

$$\frac{\partial^2 c_0}{\partial t^2}+\frac{\partial}{\partial t}\nabla_y(\mathbf{v}_0c_0)+\nabla_y(\mathbf{v}_0c_0)+\frac{\partial c_0}{\partial t} = \nabla_x[\mathbf{D}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1)]+\nabla_y[\mathbf{D}(\nabla_x c_1+\nabla_y c_2)] \tag{3.9}$$

$$\mathbf{nD}(\nabla_x c_1+\nabla_y c_2) = 0,\quad \mathbf{y}\in\Gamma \tag{3.10}$$

Используя (2.3) и соотношение $c_0 = c_0(\mathbf{x}, t)$, можно показать, что $\nabla_y(\mathbf{v}_0c_0) = 0$.

Уравнение (3.9) осредним в области Ω_p и учтем (3.10), $\nabla_y(\mathbf{v}_0 c_0) = 0$. Использование теоремы Остроградского–Гаусса окончательно приводит к

$$\frac{\partial^2 c_0}{\partial t^2} + \frac{\partial c_0}{\partial t} = \nabla_x(\mathbf{D}^* \nabla_x c_0) \tag{3.11}$$

$$\mathbf{D}^* = \langle \mathbf{D}(\mathbf{I} + \nabla_y \chi) \rangle_p = \frac{1}{\Omega_p} \int_{\Omega_p} \mathbf{D}(\mathbf{I} + \nabla_y \chi) d\Omega \tag{3.12}$$

Поскольку эффективный тензор дисперсии $\mathbf{D}^*$ является симметричным и положительно определенным тензором [15], (3.11) относится к гиперболическому типу. Член $\partial c_0/\partial t$ в этом уравнении действует как сопротивление к распространению концентрационной волны, и ее амплитуда будет уменьшаться во времени. Влияние конвективного члена, участвующего в локальном (микроскопическом) описании, не чувствуется в макроскопическом. Таким образом, головной и хвостовой концы концентрационной волны имеют четкий ступенчатый вид как в автокорреляционной модели [4]. В модели же [5] только головной конец концентрационной волны имеет четкий ступенчатый вид, а хвостовой конец асимптотически сглажен. Таким образом, полученная здесь макроскопическая модель (3.11) отличается от соответствующей феноменологической модели [5], хотя в локальном масштабе используется релаксационный закон диффузии, предложенный в [5].

Случай 3. Pa = $O(\varepsilon)$, Pe = $O(1)$. Уравнение (1.10) в данном случае имеет вид

$$\left(1 + \varepsilon \frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c)$$

Гомогенизационный анализ показывает, что в этом случае результаты [15] остаются в силе. Макроскопическое уравнение конвективной диффузии имеет вид

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} + \nabla_x(\langle \mathbf{v}_0 \rangle_p c_0) = \nabla_x(\mathbf{D}^* \nabla_x c_0) \tag{3.13}$$

где $\mathbf{D}^*$ определяется как в (3.12).

Как видно из (3.13), в данном случае получается классическое уравнение конвективной диффузии с эффективными скоростью конвекции и диффузии.

Случай 4. Pa = $O(1)$, Pe = $O(1)$. Уравнение (1.10) записывается как

$$\left(1 + \frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c)$$

Процедура гомогенизации аналогична приведенной выше. Окончательное макроскопическое уравнение имеет вид

$$\frac{\partial^2 c_0}{\partial t^2} + \frac{\partial c_0}{\partial t} + \left(1 + \frac{\partial}{\partial t}\right)\nabla_x(\langle \mathbf{v}_0 \rangle_p c_0) = \nabla_x(\mathbf{D}^* \nabla_x c_0) \tag{3.14}$$

где $\mathbf{D}^*$ определяется как в (3.12).

Уравнение (3.14) в отличие от (3.11) содержит конвективные члены и является макроскопическим аналогом модели [5]. Поскольку $\mathbf{D}^*$ симметричный и положительно определенный тензор [15], в некоторых ситуациях аналогично [5] можно ожидать, что уравнение (3.14) будет иметь только одну положительную характеристику. Следовательно, как и в [5], решение (3.14) будет иметь только один четкий ступенчатый конец в головной части профиля концентрации, а хвостовая часть будет асимптотически сглажена. В уравнении (3.14) конвективный член имеет релаксационный характер.

Случай 5. $\mathrm{Pa} = O(\varepsilon)$, $\mathrm{Pe} = O(\varepsilon^{-1})$. В предыдущих случаях с $\mathrm{Pa} = O(\varepsilon)$, $O(1)$ в качестве характерного времени текущего процесса использовалось T_d. Однако в случае $\mathrm{Pe} = O(\varepsilon^{-1})$ конвекция становится значительной и необходимо использовать два масштаба времени: t и τ (см. (2.4)). Для простоты здесь, как и прежде, используем только диффузионный масштаб времени T_d. Получаемые результаты при этом будут нечувствительными к процессам, происходящим в масштабе времени T_f, который на порядок ε меньше, чем масштаб T_d, так как $\mathrm{Pe} = O(\varepsilon^{-1})$. Следовательно, вместо уравнения (1.11) можно исследовать (1.10) с одним масштабом времени t, которое в данном случае имеет вид

$$\left(1+\varepsilon\frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{1}{\varepsilon}\nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c) \tag{3.15}$$

Асимптотическое разложение (3.15) и (1.8) при различных степенях ε дает

$$\varepsilon^{-2}\colon \nabla_y(\mathbf{v}c_0) = \nabla_y(\mathbf{D}\nabla_y c_0) \tag{3.16}$$

$$\begin{gathered}\varepsilon^{-1}\colon \frac{\partial}{\partial t}\nabla_y(\mathbf{v}_0c_0)+\nabla_x(\mathbf{v}_0c_0)+\nabla_y(\mathbf{v}_0c_1+\mathbf{v}_1c_0) = \\ = \nabla_x(\mathbf{D}\nabla_y c_0)+\nabla_y[\mathbf{D}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1)] \\ \mathbf{nD}\nabla_y c_0 = 0, \quad \mathbf{y}\in\Gamma\end{gathered} \tag{3.17}$$

$$\begin{gathered}\varepsilon^{0}\colon \frac{\partial c_0}{\partial t}+\frac{\partial}{\partial t}[\nabla_x(\mathbf{v}_0c_0)+\nabla_y(\mathbf{v}_1c_0+c_1\mathbf{v}_0)]+\nabla_x(\mathbf{v}_0c_1+\mathbf{v}_1c_0)+ \\ +\nabla_y(\mathbf{v}_0c_2+\mathbf{v}_1c_1+\mathbf{v}_2c_0) = \nabla_x[\mathbf{D}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1)]+\nabla_y[\mathbf{D}(\nabla_x c_1+\nabla_y c_2)]\end{gathered} \tag{3.18}$$

$$\mathbf{nD}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1) = 0, \quad \mathbf{y}\in\Gamma \tag{3.19}$$

$$\varepsilon^{1}\colon \mathbf{nD}(\nabla_x c_1+\nabla_y c_2) = 0, \quad \mathbf{y}\in\Gamma \tag{3.20}$$

Используя (3.16), можно показать, что и в данном случае справедливо $c_0 = c_0(\mathbf{x}, t)$. Преобразуем члены в левой части (3.17) с учетом $c_0 = c_0(\mathbf{x}, t)$ и (2.3)

$$\frac{\partial}{\partial t}\nabla_y(\mathbf{v}_0c_0) = \frac{\partial}{\partial t}(c_0\nabla_y\mathbf{v}_0+\mathbf{v}_0\nabla_y c_0) = 0 \tag{3.21}$$

$$\begin{gathered}\nabla_x(\mathbf{v}_0c_0)+\nabla_y(\mathbf{v}_0c_1+\mathbf{v}_1c_0) = \mathbf{v}_0\nabla_x c_0+c_0\nabla_x\mathbf{v}_0+c_0\nabla_y\mathbf{v}_0+ \\ +\mathbf{v}_0\nabla_y c_1+c_0\nabla_y\mathbf{v}_1+\mathbf{v}_1\nabla_y c_0 = \mathbf{v}_0(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1)\end{gathered} \tag{3.22}$$

С учетом (3.21), (3.22), а также $c_0 = c_0(\mathbf{x}, t)$ уравнение (3.17) принимает вид

$$\mathbf{v}_0(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1) = \nabla_y[\mathbf{D}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1)] \tag{3.23}$$

Уравнение (3.23) рассмотрим вместе с (3.19). Очевидно, что c_1 является линейной функцией $\nabla_x c_0$

$$c_1 = \chi_1\nabla_x c_0+\bar{c}_1(\mathbf{x}, t) \tag{3.24}$$

где аналогично (3.10) χ_1 – периодическая в представительном элементарном объеме функция с $\langle\chi_1\rangle_p = 0$, $\bar{c}_1(\mathbf{x}, t)$ – произвольная функция.

Тогда из (3.23), (3.19) получаем следующую локальную задачу для определения χ_1:

$$\mathbf{v}_0(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_1) = \nabla_y[\mathbf{D}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_1)]; \quad \mathbf{nD}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_1) = 0, \quad \mathbf{y}\in\Gamma \tag{3.25}$$

Интегрируем (3.18) в области Ω_p, применив теорему Остроградского–Гаусса, с учетом $\mathbf{v} = 0$, $y \in \Gamma$, (3.20) получим

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}\nabla_x(\langle\mathbf{v}_0\rangle_p c_0) + \nabla_x(\langle\mathbf{v}_0 c_1\rangle_p + \langle\mathbf{v}_1\rangle_p c_0) = \nabla_x(\mathbf{D}_1^*\nabla_x c_0) \tag{3.26}$$

$$\mathbf{D}_1^* = \langle\mathbf{D}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_1)\rangle_p = \frac{1}{\Omega_p}\int\limits_{\Omega_p}\mathbf{D}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_1)d\Omega \tag{3.27}$$

Уравнение (3.26) является макроскопическим уравнением переноса вещества. Нетрудно обнаружить, что это уравнение конвективной диффузии со сложным конвективным членом, имеющим релаксационный характер.

Случай 6. Pa = $O(1)$, Pe = $O(\varepsilon^{-1})$. Уравнение (1.10) принимает вид

$$\left(1+\frac{\partial}{\partial t}\right)\left[\frac{\partial c}{\partial t}+\frac{1}{\varepsilon}\nabla(\mathbf{v}c)\right] = \nabla(\mathbf{D}\nabla c) \tag{3.28}$$

Асимптотическое разложение (3.28) при различных степенях ε дает

$$\varepsilon^{-2}: \left(1+\frac{\partial}{\partial t}\right)\nabla_y(\mathbf{v}_0 c_0) = \nabla_y(\mathbf{D}\nabla_y c_0) \tag{3.29}$$

$$\varepsilon^{-1}: \left(1+\frac{\partial}{\partial t}\right)[\nabla_x(\mathbf{v}_0 c_0)+\nabla_y(\mathbf{v}_0 c_1+\mathbf{v}_1 c_0)] = \nabla_x(\mathbf{D}\nabla_y c_0)+\nabla_y[\mathbf{D}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1)] \tag{3.30}$$

$$\varepsilon^0: \frac{\partial^2 c_0}{\partial t^2}+\frac{\partial c_0}{\partial t}+\left(1+\frac{\partial}{\partial t}\right)[\nabla_x(\mathbf{v}_1 c_0+\mathbf{v}_0 c_1)+\nabla_y(\mathbf{v}_2 c_0+\mathbf{v}_1 c_1+\mathbf{v}_0 c_2)] = \\ = \nabla_x[\mathbf{D}(\nabla_x c_0+\nabla_y c_1)]+\nabla_y[\mathbf{D}(\nabla_x c_1+\nabla_y c_2)] \tag{3.31}$$

Уравнения (3.29)–(3.31) рассматриваются вместе с (3.17), (3.19), (3.20).

Аналогично приведенной выше процедуре можно показать, что c_0 является только функцией $\mathbf{x}$ и t, т.е. $c_0 = c_0(\mathbf{x}, t)$. Вместо задачи (3.24), (3.25) получим

$$c_1 = \chi_2\nabla_x c_0+\bar{c}_1(\mathbf{x},t), \quad \langle\chi_2\rangle_p = 0 \tag{3.32}$$

где $\bar{c}_1(\mathbf{x}, t)$ – произвольная функция,

$$\left(1+\frac{\partial}{\partial t}\right)[\mathbf{v}_0(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_2)] = \nabla_y[\mathbf{D}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_2)]; \quad \mathbf{nD}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_2) = 0, \quad \mathbf{y}\in\Gamma \tag{3.33}$$

Осредняя (3.31) в Ω_p приходим к следующему макроскопическому уравнению

$$\frac{\partial^2 c_0}{\partial t^2}+\frac{\partial c_0}{\partial t}+\left(1+\frac{\partial}{\partial t}\right)\nabla_x(\langle\mathbf{v}_0 c_1\rangle_p+\langle\mathbf{v}_1\rangle_p c_0) = \nabla_x(\mathbf{D}_2^*\nabla_x c_0) \tag{3.34}$$

$$\mathbf{D}_2^* = \langle\mathbf{D}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_2)\rangle_p = \frac{1}{\Omega_p}\int\limits_{\Omega_p}\mathbf{D}(\mathbf{I}+\nabla_y\chi_2)d\Omega \tag{3.35}$$

Если $\mathbf{D}_2^*$ – положительно определенный тензор, то уравнение (3.34) имеет гиперболический тип. Концентрационная волна является затухающей за счет члена $\partial c_0/\partial t$, а конвективный перенос имеет сложный релаксационный характер. Положительная определенность тензора $\mathbf{D}_2^*$ может быть установлена аналогично [15, 18, 19].

Используя (2.3), уравнения (3.26), (3.34) можно преобразовать как

$$\frac{\partial c_0}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial t}\nabla_x(\langle \mathbf{v}_0\rangle_p c_0) + \nabla_x(\langle \mathbf{v}_0\rangle_p \bar{c}_1 + \langle \mathbf{v}_1\rangle_p c_0) = \nabla_x(\mathbf{D}_{1\mathrm{app}}^* \nabla_x c_0)$$

$$\frac{\partial^2 c_0}{\partial t^2} + \frac{\partial c_0}{\partial t} + \left(1 + \frac{\partial}{\partial t}\right)\nabla_x(\langle \mathbf{v}_0\rangle_p \bar{c}_1 + \langle \mathbf{v}_1\rangle_p c_0) = \nabla_x(\mathbf{D}_{2\mathrm{app}}^* \nabla_x c_0)$$

$$\mathbf{D}_{1\mathrm{app}}^* = \mathbf{D}_1^* + \mathbf{A}_1 \nabla_x p_0, \quad \mathbf{A}_1 = \langle \mathbf{k}\chi_1\rangle_p$$

$$\mathbf{D}_{2\mathrm{app}}^* = \mathbf{D}_2^* + \mathbf{A}_2 \nabla_x p_0, \quad \mathbf{A}_2 = \left(1 + \frac{\partial}{\partial t}\right)\langle \mathbf{k}\chi_2\rangle_p$$

Заметим, что $\mathbf{D}_{2\mathrm{app}}^*$ зависит от времени и при больших t достигает определенного своего значения. Переходной характер тензора диффузии в рамках феноменологических моделей отмечен в [6–8].

Заключение. В различных ситуациях изменения безразмерных чисел Pa, Pe получаем макроскопические уравнения, свойства которых существенно могут отличаться друг от друга. При слабых релаксационных эффектах в локальном масштабе (Pa = $O(\varepsilon)$), где ε – малый параметр, характеризующий разделение масштабов $\varepsilon = l/L$, и когда скорость течения жидкости мала или умеренна (Pe = $O(\varepsilon)$, $O(1)$), макроскопические уравнения переноса вещества имеют классический вид – параболические уравнения диффузии или конвекции-диффузии. При больших скоростях течения жидкости (Pe = $O(\varepsilon^{-1})$) получается макроскопическое уравнение переноса параболического типа – уравнение конвекции-диффузии со сложным, релаксирующим конвективным членом. При умеренных релаксационных эффектах (Pa = $O(1)$) макроскопические уравнения переноса вещества имеют гиперболический тип, где в зависимости от значения Pe конвективные члены могут либо отсутствовать, либо иметь сложный релаксационный характер. Концентрационные волны имеют различные профили, вид которых определяется значением Pe. При малых скоростях течения жидкости получается макроскопический аналог автокорреляционной модели [4], а при умеренных скоростях – макроскопический аналог модели [5].

Часть работы выполнена по гранту НАТО № 25 C OO FR во время научной командировки автора в Гренобльский университет (Франция). Автор благодарит проф. J-L. Auriault за полезные обсуждения и внимание к работе.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Bacri J.-C., Bouchaud J.P., Georges A., Guyon E., Hulen J.P., Rakotomatala N., Salin D.* Transient non-Gaussian trace dispersion in porous media // Hydrodynamics of Dispersed Media / Eds. J.P. Hulen et al., Amsterdam: Elsevier, 1990. P. 249–269.
2. *Brady J.F.* Dispersion in heterogeneous media // Hydrodynamics of Dispersed Media / Eds J.P. Hulen et al., Amsterdam: Elsevier, 1990. P. 271–285.
3. *Matheron G., de Marsily G.* Is transport in porous media always diffusive? A counterexample // Water Resours. Res. 1980. V. 16. № 5. P.901–917.
4. *Scheidegger A.* The Physics of Flow Through Porous Media. Toronto: Univ. of Toronto Press, 1960.
5. *Strack O.D.L.* A mathematical model for dispersion with a moving front in groundwater // Water Resours. Res. 1992. V. 28. № 11. P. 2973–2980.

6. *Hassanizadeh S.M.* On the transient non-Fickian dispersion theory // Transp. Porous Media. 1996. V. 23. № 1. P. 107–124.
7. *Cushman J.H., Ginn T.R.* Non local dispersion in media with continuously evolving scales of heterogeneity // Transp. Porous Media. 1993. V. 13. № 1. P. 123–138.
8. *Cushman J.H., Hu B.X., Ginn T.R.* Nonequilibrium statistical mechanics of preasymptotic dispersion // J. Stat. Phys. 1994. V. 75. № 5–6. P.859–878.
9. *Хонькин А.Д.* О тейлоровой и гиперболической моделях нестационарной продольной дисперсии пассивной примеси в конвективно-диффузионных процессах // ПММ. 2000. Т. 64. Вып. 4. С. 631–643.
10. *Вестертерп К.Р., Дильман В.В., Кронберг А.Е., Беннекер А.* Волновая модель продольного перемешивания // Теорет. основы хим. технологии. 1995. Т. 29. № 6. С. 580–587.
11. *Бахвалов Н.С., Панасенко Г.П.* Осреднение процессов в периодических средах. М.: Наука, 1984. 352 с.
12. *Bensoussan A., Lions J-L., Papanicolaou G.* Asymptotic Analysis for Periodic Structures. Amsterdam: Nort-Holland, 1978. 700 p.
13. *Sanches-Palencia E.* Non-Homogeneous Media and Vibration Theory // Lecture Notes in Physics. V. 127. Berlin: Springer, 1980. 398 p.
14. *Canon E., Bensmina H., Valentin P.* On the modelling of generalized Taylor-Aris dispersion in chromatographs via multiple scales expansions // Transp. Porous Media. 1999. V. 36. № 3. P. 307–339.
15. *Auriault J.-L., Adler P.M.* Taylor dispersion in porous media: Analysis by multiple scale expansions // Adv. Water Resources. 1995. V. 18. № 4. 217–226.
16. *Auriault J.-L., Lewandowska J.* Diffusion-adsorption-advection macrotransport in soils // Eur. J. Mech. A. Solids. 1996. V. 15. № 4. P. 681–704.
17. *Auriault J.-L., Lewandowska J.* Effective diffusion coefficient: From homogenization to experiment // Transp. Porous Media. 1997. V. 27. № 2. P. 205–223.
18. *Auriault J.-L., Lewandowska J.* Homogenization analysis of diffusion and adsorption macrotransport in porous media: Macrotransport in the absence of advection // Géotechnique. 1993. V. 43. № 3. P. 457–469.
19. *Auriault J.-L., Lewandowska J.* Macrotransport modelling of pollutant transport in porous media // Arch. Mech. 1993. V. 45. № 1. P. 51–64.
20. *Auriault J.-L., Lewandowska J.* Non-Gaussian diffusion modeling in composite porous media by homogenization: Tail effect // Transp. Porous Media. 1995. V. 21. № 1. P. 47–70.
21. *Khuzhayorov B.Kh., Auriault J.-L., Royer P.* Macroscopic modelling of solute transport in porous media saturated by two immiscible liquids // Poromechanics II. Proc. 2nd Biot Conf. on Poromechanics. Grenoble, France, 2002 / Ed. J.-L. Auriault etc., Netherlands: A.A. Balkema Publ., 2002. P. 473–479.
22. *Auriault J.-L.* Heterogeneous medium. Is an equivalent macroscopic description possible? // Intern. J. Engng Sci. 1991. V. 29. № 7. P. 785–795.

Самарканд

Поступила в редакцию
13.II.2003