

УДК 556.388

к.т.н. Телима С.В.,  
Інститут гідромеханіки НАН України, м. Київ

## ВИЗНАЧЕННЯ ПАРАМЕТРІВ МАСОПЕРЕНОСУ ПО ДАНИМ ДОСЛІДНИХ РОБІТ

*Розроблено методика розв'язку обернених задач масопереносу по визначенню невідомих параметрів з використанням даних дослідних робіт по простеженню за переносом індикаторних речовин у водонасиченому пористому середовищі. Показано можливості обробки дослідних даних по одиночним свердловинам, що значно знижує вартість проведення польових робіт. Рекомендується застосування методики обробки даних на підтоплених територіях з неглибоким заляганням ґрунтових вод від поверхні землі*

*Ключові слова: масоперенос, дифузія, дисперсія, речовина-індикатор, обернена задача, чисельно-аналітичні розв'язки*

За останні роки багатьма вченими проведено значні дослідження стосовно використання моделей масопереносу в задачах забруднення підземних вод та масообміну [1,3,6,7]. При цьому значну увагу приділено розробці методів визначення міграційних параметрів по даним дослідних робіт з індикаторами [3,4,8,9,11,12]. Проведення цих робіт полягає у простеженні руху індикатора, що подається в центральну свердловину, в спостережних. При цьому приймається припущення про досконалість всіх свердловин в режимі нагнітання індикатора і його відбору в спостережних свердловинах.

Задачу визначення параметрів масопереносу можна зформулювати як задачу ідентифікації коефіцієнтів рівнянь масопереносу і масообміну при відомих граничних умовах по даним дослідних робіт. При цьому використовуються методи одиничного випробування водоносної товщі та обробка даних методами оптимізації [6,7,8,10].

Методи одиничного випробування, які базуються на теорії потенціалу, досить ефективно використовуються для визначення швидкості потоків підземних вод, їх напрямку та вертикальної складової на основі даних спостережень за розчиненням індикаторів в одиночних свердловинах. Проте, незважаючи на суттєві досягнення у розробці методів одиничного випробування водовміщуючих порід, проблеми переносу забруднюючих речовин у підземних водах не можуть бути повністю розв'язані без врахування процесів гідродинамічної дисперсії. У зв'язку з цим ведуться інтенсивні лабораторні та польові дослідження по оцінці вказаних вище параметрів. Як результат, отримано значення міграційних параметрів в широкому діапазоні їх

значень. При цьому основна увага приділялась і приділяється визначенню достовірних параметрів масопереносу, так як вже розроблені досить ефективні алгоритми розв'язку основних рівнянь масопереносу з достатньою для практичних цілей точністю [6,10].

В даній роботі розглянуто асимптотичні методи розв'язку рівняння масопереносу для задачі розчинення речовини - індикатора в окремій свердловині. Пропонується алгоритм оптимізації розв'язку без обчислення похідних першого порядку критичної функції для розрахунків швидкостей підземних вод і коефіцієнтів повздовжньої і поперечної дисперсії, як невідомих параметрів асимптотичного розв'язку задачі перерозподілу концентрації індикаторного розчину на основі даних дослідних робіт.

Розглянемо постановку задачі. У припущенні постійного потоку підземних вод в  $x$ -му напрямку, загальне диференціальне рівняння, що описує зміну концентрації консервативної індикаторної речовини в двовірному потоці, має наступний вигляд [1,7,8,10]:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( D_* \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_{**} \frac{\partial c}{\partial y} \right) - v \frac{\partial c}{\partial x} = \frac{\partial c}{\partial t}, \quad (1)$$

де  $x, y$  - декартові координати (вісь  $x$  направлена в сторону потоку підземних вод);  $t$  - час, доба;  $c$  - концентрація індикатора, г/л;  $v$  - середня швидкість в порах, м/добу;  $D_*, D_{**}$  - коефіцієнти відповідно повздовжньої і поперечної дисперсії, м<sup>2</sup>/добу.

Початкові і граничні умови відповідають випадку раптової ін'єкції індикатора на всю потужність водоносного горизонту з пульсовою концентрацією на початок дослідів і мають наступний вигляд:

$$c(x, y, 0) = \frac{m}{n} \sigma(x) \sigma(y) \quad (2)$$

$$m = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} n \cdot c(x', y', t) dx' dy' \quad (3)$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} c(x, y, t) = 0, \quad \lim_{|y| \rightarrow \infty} c(x, y, t) = 0, \quad (4)$$

де  $m$  - загальна кількість речовини - індикатора, що раптово подається у водоносний горизонт, г;  $n$  - пористість середовища;  $\sigma$  - дельта-функція Дірака.

Якщо зробити заміну змінних виду  $X = x - vt$  і  $Y = y$ , то рівняння (1) можна переписати як:

$$\frac{\partial}{\partial X} \left( D_* \frac{\partial c}{\partial X} \right) + \frac{\partial}{\partial Y} \left( D_{**} \frac{\partial c}{\partial Y} \right) = \frac{\partial c}{\partial t}. \quad (5)$$

Так як величина  $vt$  обмежена, то початкові і граничні умови не змінюються. Звідси, розв'язок рівняння (5) при тих же крайових умовах буде наступним [15]:

$$c = \frac{m/n}{4\pi t (D_* D_{**})^{1/2}} \exp(-X^2/4D_*t - Y^2/4D_{**}t). \quad (6)$$

На основі припущення, що свердловина заповнена тим же матеріалом, що і водоносний горизонт, можна отримати два типи асимптотичних розв'язків для обробки даних дослідних робіт в окремій свердловині.

Якщо перетин свердловини має прямокутну форму, то її центр співпадає з початком координат, а  $x$ -ий напрямок співпадає з потоком підземних вод. При цьому початкові і граничні умови для раптової подачі індикатора на повну потужність горизонту будуть:

$$c(x, y, 0) = c_0, \quad |x| \leq a \quad \text{і} \quad |y| \leq b \quad (7)$$

$$c(x, y, 0) = 0, \quad |x| > a \quad \text{і} \quad |y| > b \quad (8)$$

$$\lim_{|x| \rightarrow \infty} c(x, y, 0) = 0, \quad \lim_{|x| \rightarrow \infty} c(x, y, 0) = 0 \quad |y| \leq b. \quad (9)$$

Так як виконане вище перетворення координат не змінює крайових умов, то будь-який розв'язок рівняння (5) можна отримати шляхом інтегрування величини  $c_0 dX' dY'$  по усьому контуру свердловин:

$$c = \int_{-b-a} \int \left[ c_0 dX' dY' / 4\pi t (D_* D_{**})^{1/2} \right] \exp \left[ -(X - X')^2 / 4D_*t - (Y - Y')^2 / 4D_{**}t \right]. \quad (10)$$

Рівняння (10) можна переписати у наступному вигляді:

$$\begin{aligned} c/c_0 = & \frac{1}{4} \left[ \operatorname{erf} \left\{ (a + X) / (4D_*t)^{1/2} \right\} + \operatorname{erf} \left\{ (a - X) / (4D_*t)^{1/2} \right\} \times \right. \\ & \left. \times \operatorname{erf} \left\{ (b + Y) / (4D_{**}t)^{1/2} \right\} + \operatorname{erf} \left\{ (b - Y) / (4D_{**}t)^{1/2} \right\} \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

Якщо концентрація розчину змінюється в центрі свердловини з квадратним перетином ( $b=a$ ), то (11) можна привести до рівняння наступного вигляду:

$$c/c_0 = \frac{1}{2} \left[ \operatorname{erf} \left\{ (a - vt) / (4D_*t)^{1/2} \right\} + \operatorname{erf} \left\{ (a + vt) / (4D_*t)^{1/2} \right\} \right] \times \operatorname{erf} \left\{ a / (4D_{**}t)^{1/2} \right\}, \quad (12)$$

так як  $X = -vt$ , а  $Y = 0$ .

У випадку свердловини з круговим перетином замість декартової системи координат  $(x, y)$  використовується полярна система  $(r, \theta)$ . При цьому початкові і граничні умови при раптовій подачі індикатора в кругову свердловину радіусом  $R$  задаються як [15]:

$$c(r, 0) = c_0, \quad 0 \leq r \leq R \quad (13)$$

$$c(r, 0) = 0, \quad r > R \quad (14)$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} c(r, t) = 0. \quad (15)$$

У припущенні, що  $D_* = D_{**} = D$  аналітичний розв'язок (5) при заданих вище крайових умовах буде [13-15]:

$$\begin{aligned} c &= \iint_{\sqrt{X^2+Y^2} \leq R} (c_0 dX'dY' / 4\pi Dt) \exp\left\{-\frac{(X - X')^2}{4Dt} - \frac{(T - Y')^2}{4Dt}\right\} = \\ &= (c_0 / 4\pi Dt) \int_0^R \exp\left\{-\frac{(r^2 + r'^2)}{4Dt}\right\} r' dr' \int_0^{2\pi} \exp(2rr' \cos \theta' / 4Dt) d\theta' = \\ &= (c_0 / 2Dt) \int_0^R \exp\left\{-\frac{(r^2 + r'^2)}{4Dt}\right\} I_0(rr' / 2Dt) r' dr' = \\ &= c_0 P\left\{R / (2Dt)^{1/2}, \quad r / (2Dt)^{1/2}\right\}, \end{aligned} \quad (16)$$

де  $I_0$  - модифікована функція Бесселя нульового порядку першого типу, а  $P$  - так звана  $P$ -функція, яка табульована. В центрі свердловини відносна концентрація індикатора буде:

$$c / c_0 = P\left\{R / (2Dt)^{1/2}, \quad vt / (2Dt)^{1/2}\right\}. \quad (17)$$

Запропоновані асимптотичні розв'язки (12) і (17) не дають точних значень концентрацій в центрі кругової свердловини, з якої раптово закачуваний індикатор виноситься за рахунок гідродинамічної дисперсії і конвекції потоку. Для порівняння цих розв'язків, а також з метою дослідження фізичної сторони процесу в рівняннях (6) і (12) задавались однакові значення швидкості підземних вод і середній коефіцієнт дисперсії ( $v = v$  і  $D_* = D_{**} = D$ ). На рис.1 приведені для порівняння графіки, побудовані по даним рішенням в координатах відносної концентрації і безрозмірного параметру  $vt / (2Dt)$  для трьох різних систем параметрів.

У припущенні рівності кругового перетину площі відповідного квадратного перетину використовувалось наступне співвідношення між  $a$  і  $R$ :

$$a = 0.5R\pi^{1/2}. \quad (18)$$

Тоді  $A_*$  і  $R_*$  на рис. 1 будуть безрозмірними величинами, вираженими відповідно через  $a/(2Dt)^{1/2}$  і  $R/(2Dt)^{1/2}$ . Рівняння (6) модифіковано шляхом введення параметрів  $m = c_0 n \pi R^2$ ,  $x = -vt$  і  $Y = 0$ .

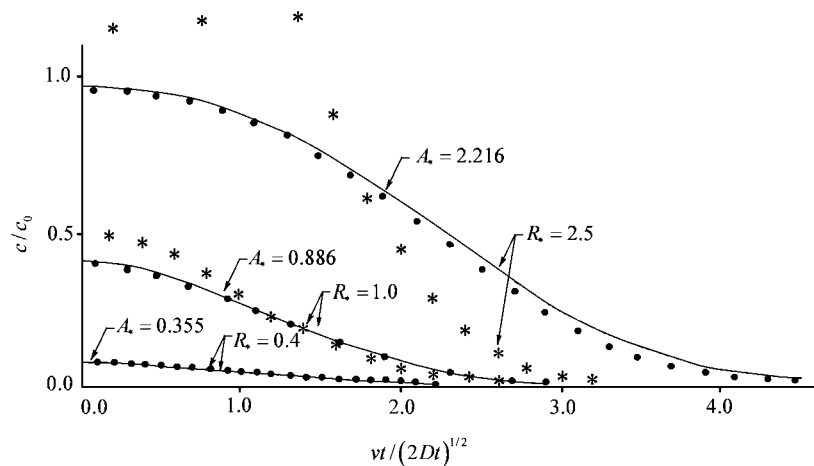


Рис.1. Графіки, побудовані по даним розв'язків рівнянь (12) (точки), (17) (суцільна лінія) та (3) (зірочки) при  $A_* = a/(2Dt)^{1/2}$  і  $R_* = R/(2Dt)^{1/2}$

Як видно з рисунку, спостерігається добре узгодження розв'язків по (12) і (17). При малих значеннях  $A_*$  і  $R_*$ , тобто, при малих радіусах свердловини, або великих значеннях  $Dt$  збіг розв'язків досить хороший. З іншої сторони, через експоненціальну природу рівняння (6) розв'язок задачі подачі індикатора в свердловину не має бажаної точності за виключенням точок при малих значеннях  $R_*$ , тобто, асимптотичні розв'язки дають завищені значення у порівнянні з рівнянням (6), але їх точність достатня для обробки даних дослідних робіт по окремим свердловинам. Так як для випадку ізотропної дисперсії ( $D_* = D_{**}$ ) спостерігається добрий збіг результатів розв'язків по (12) і (17), то можна припустити, що розв'язок (12) може дати вірогідні результати і у випадку анізотропної дисперсії ( $D_* \neq D_{**}$ ).

Перед тим, як вибрати кращий асимптотичний розв'язок необхідно дослідити чутливість кожного з параметрів до цих рішень. На рис. 2 приведені два типових розв'язки задачі в залежності від значень вхідних параметрів. Якщо зміна відношень між  $D_*$  і  $D_{**}$  не впливає на результати розв'язків, то їх

не можна використовувати для визначення трьох невідомих параметрів (швидкості підземних вод, повздовжньої та поперечної дисперсії) із-за відсутності чутливості рішень до зміни вхідних параметрів. Навпаки, якщо зміна відношення між  $D_*$  і  $D_{**}$  суттєво впливає на вихідну величину концентрації, то тоді є можливість розв'язати обернену задачу.

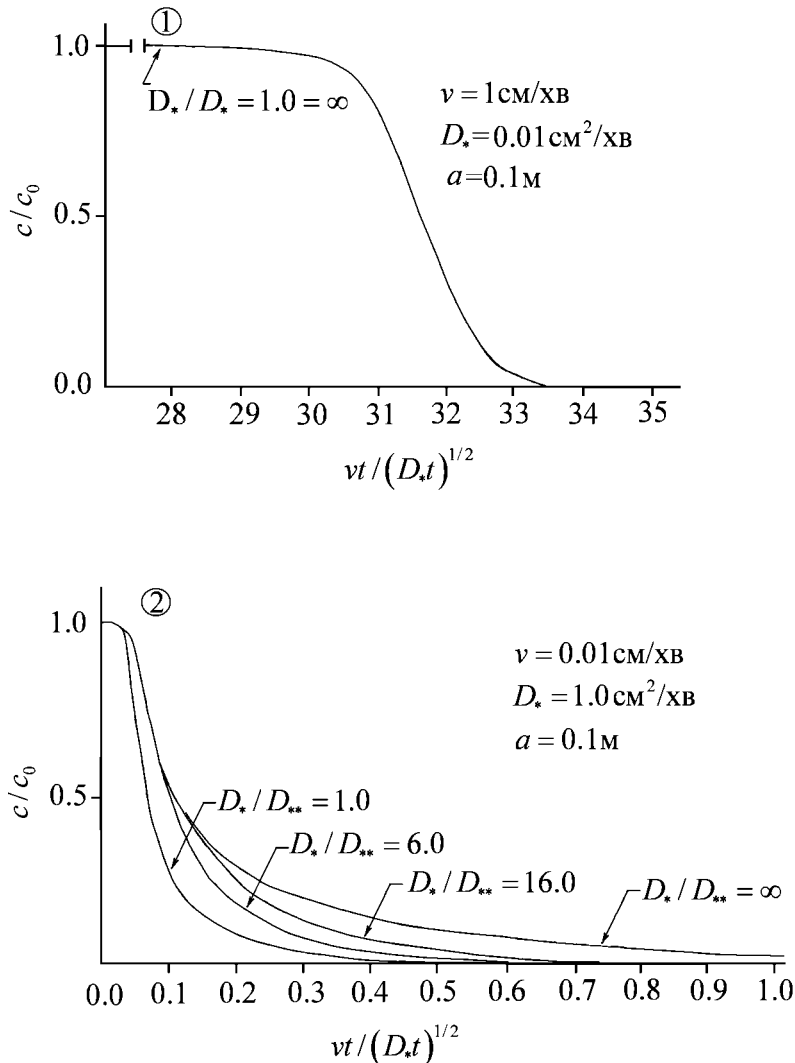


Рис. 2. Чутливість геофільтраційних параметрів в рівнянні (12) до різних відношень  $D_*/D_{**}$ :

1 -  $v = 1.0$  см/хв,  $D_* = 0.01$  см<sup>2</sup>/хв;

2 -  $v = 0.01$  см/хв,  $D_* = 1.0$  см<sup>2</sup>/хв;

$c/c_0$  - відносна концентрація

Слід зауважити, що розв'язки (12) і (17) отримані на основі припущення, що свердловина заповнена тим же матеріалом, що і водоносний горизонт. Проте, в свердловині, як правило, міститься вода. У зв'язку з цим проводились відповідні дослідження по оцінці впливу умов у свердловині на зміну

концентрації на основі чисельного розв'язку одновимірної задачі по методу характеристик [2, 5].

Якщо свердловини заповнені тільки водою, то концентрація індикатора, що подається, у центрі свердловини залишається однаковою досить довго, а потім різко падає. Це пояснюється тим, що в свердловинах швидкість фільтрації падає на величину ефективної пористості і у цьому випадку молекулярна дифузія стає домінуючою над механічною дисперсією, яка, як правило, грає більш важливішу роль в масопереносі в підземних водах у порівнянні з молекулярною дифузією [1,2,4,8,9].

Для визначення невідомих міграційних параметрів рівняння (12) і (17) повинні розв'язуватись відносно цих параметрів на основі даних простеження за концентрацією індикатора, що раптово подається у свердловину. Для цього використовуються методи оптимізації [5,16].

У даному випадку пропонується метод Паувелла, який представляє собою процедуру мінімізації функції декількох змінних без обчислення похідних [13,16].

Найчастіше для оцінки різниці між розрахунковими та дослідними даними використовують функцію мінімізації по методу найменших квадратів [13,14,16]:

$$F = \sum_{i=1}^M (f_i - f_{i*})^2, \quad (19)$$

де  $f_i$  і  $f_{i*}$  - відповідно розрахункові і дослідні дані відносної концентрації індикатора при  $t = t_i$ , а  $M$  - загальна кількість даних. Сама процедура мінімізації детально описана в роботі [16]. Слід зауважити, що в процесі мінімізації (19) може трапитись ситуація, коли функція мінімізації приводить до негативних значень незалежних змінних. Оскільки всі значення параметрів, що ідентифікуються, є позитивними, то використовується наступна штрафна функція [15, 16]:

$$F = S \cdot (|X_j| + 1.0), \quad (20)$$

де  $S$  - позитивне число, яке більше на декілька порядків, чим значення функції критерію в очікуваній області розв'язків, а  $X_j$  -  $j$ -а змінна, яка може приймати від'ємне значення протягом процесу чисельного розв'язку.

Даний метод допускає збіг процесу розв'язку, хоча розв'язок може не сходиться до дійсних значень невідомих параметрів. У такому випадку рекомендується повторна процедура оптимізації для досягнення потрібної точності невідомих параметрів.

На рис. 3 приведені результати обробки натурних даних для визначення швидкості підземних вод та коефіцієнтів дисперсії на основі розв'язку

оберненої задачі масопереносу згідно рівняння (12) та використання методу оптимізації по методу Паувела. Закачка індикатора була проведена в береговій зоні у водоносний горизонт з відносно однорідною пісчаною товщою. У якості індикатора використовувався хлористий натрій, так як його концентрація досить легко визначається у пористому середовищі геофізичними методами. Датчик, що вимірював електропровідність розчину, знаходився на 5 см нижче поверхні ґрунтових вод і на 36 см нижче поверхні землі по осі свердловини радіусом 0.06 м. Концентрація індикатора вимірювалась через кожні 2 хв протягом 250 хв після того, як розчин хлористого натрію був раптово поданий по всій довжині свердловини, яка заповнена аналогічними пісчаними відкладами, що формують водоносний горизонт.

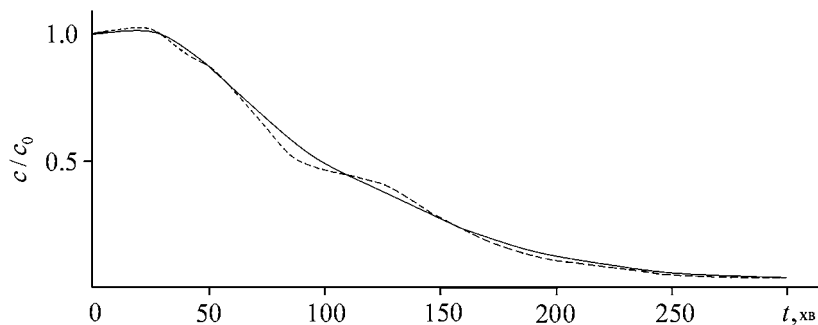


Рис. 3. Порівняльні графіки відносної концентрації ( $c/c_0$ ), розраховані по формулі (6) (теоретична крива – суцільна лінія), і по даним спостережень в окремій свердловині (пунктирна крива)

На рис. 3 точками позначена експериментальна крива відносної концентрації NaCl в ґрунтовому потоці. Ці дані використовувались у якості висхідної системи даних для ідентифікації невідомих параметрів. В результаті були отримані відповідні значення швидкості ґрунтового потоку, коефіцієнтів повздовжньої та поперечної дисперсії і відношення  $D_*/D_{**}$  - 0,0715 см/хв, 0.03 см/хв, 0.025 см<sup>2</sup>/хв і 3.72. Суцільною лінією показана теоретична крива, розрахована по (6) з використанням параметрів по експериментальним даним. Порівняння дослідної та теоретичної кривих свідчить про достатню для розрахунків їх збіжність, тобто, отримані значення невідомих параметрів достатньо вірогідні та правдоподібні з фізичної точки зору.

Результати проведених досліджень дозволяють зробити висновки, що для одночасного визначення швидкостей ґрунтового потоку та коефіцієнтів гідродинамічної дисперсії можна використовувати дані дослідних робіт в одиночних свердловинах по подачі індикаторних речовин в водоносний



горизонт. Для цього пропонуються два асимптотичних розв'язки рівняння конвективної дисперсії та методика мінімізації по методу Паувела для розв'язку оберненої задачі масопереносу для визначення невідомих параметрів на основі дослідних робіт про зміни концентрації індикаторної речовини у одиночних свердловинах. При цьому вибір розв'язку залежить також від умов проведення дослідних робіт, наприклад, якщо конвективний перенос є домінуючим в процесі масопереносу, то розв'язок оберненої задачі по визначенню невідомих параметрів неможливий із-за низької чутливості розв'язків до змін значень цих параметрів.

Перевага запропонованої в даній роботі методики розв'язку оберненої задачі масопереносу полягає у тому, що для визначення невідомих параметрів достатньо проведення дослідних робіт в одиночних свердловинах. При цьому значно скорочується тривалість проведення дослідів та витрати на буріння спостережних свердловин у порівнянні з проведенням дослідних робіт на системах свердловин. Слід зауважити, що незважаючи на очевидні переваги даного методу існує необхідність враховувати фільтрацію в самій свердловині, тобто свердловина повинна бути заповнена однаковим матеріалом, що і сам водоносний горизонт. У такому випадку є можливість отримати вірогідну збіжність експериментальних і теоретичних кривих. Як показано вище, для умов безнапорного потоку з неглибоким заляганням рівнів ґрунтових вод, що має місце в підтоплених регіонах країни, такі умови можуть мати місце. Для більш широкого використання даної методики необхідно застосовувати спеціальне обладнання для буріння та оснащення свердловин.

### Література

1. *Алексеев В.С., Коммунир Г.М., Шержуков Б.С.* Массоперенос в водонасыщенных горных породах. Итоги науки и техники. Гидрогеология и инженерная геология. М. ВОДГЕО, 1989. – 144 с.
2. *Гидродинамические и физико-химические свойства горных пород.* М., Недра, 1977. – 271 с.
3. *Дубинчук В.Т.* Построение моделей гидродинамических систем и их идентификация на основе данных. Сб. наук.- техн. тр. «Математические методы идентификации моделей», М., 1983. – С. 89-97.
4. *Карпенко Н.П., Манукьян Д.А.* Определение миграционных параметров по данным опытных работ и режима эксплуатации. Сб. «Вопросы обоснования мелиорации и охрана природы», М., 1983. – С. 105-115.
5. *Кочиш В.М., Милютин А.Ф., Тельма С.В.* О минимизации функции отклонения методом Флетчера-Пауэлла. Тез докл. I Всесоюзн. Симпозиума «Механика и физика разрушения композитных материалов и конструкций», Ужгород, УжГУ, 1988. – С.42.
6. *Ломакин Е.А., Мироненко В.А., Шестаков В.М.* Численное моделирование геофильтрации. М., Недра, 1988. – 228 с.
7. *Лукнор Л., Шестаков В.М.* Моделирование миграции подземных вод. М., Недра, 1986. – 207 с.

8. Мироненко В.А., Румынин В.Г. Опытные-миграционные работы в водоносных пластах. – М., Недра, 1986. – 240 с.
9. Орадовская А.Е., Ефремова А.В. Определение миграционных параметров водоносных горизонтов при нестабильном вводе индикатора. Сб. научн. тр. «Защита подземных вод от истощения и загрязнения», М. ВОДГЕО, М., 1989. – С. 7-10.
10. Решение задач охраны подземных вод на численных моделях. М., Недра, 1992. – 240 с.
11. Рошаль А.А. Полевые методы определения миграционных параметров. Обзор. инф. ВИЭМС. М., 1980. Вып. 7, Гидрогеология и инженерная геология. – 62 с.
12. Самсонов Б.Г., Самсонова Л.М. Миграция вещества и решение гидрогеологических задач. М., Недра, 1987. – 118 с.
13. Bruch J. C., Lain C. M., Simundich T. M. Parameter identification in field problems. Water Resour. Res., 1974, Vol. 10, no. 1. - P. 73-79.
14. Fletcher R., Powell M.J.D. A rapidly convergent descent method for minimization Computer J., 1963, vol. 6. – P. 163-168.
15. Fujinava K. Asymptotic solutions to the convection-dispersion equation and Powell's optimization method for evaluating groundwater velocity and dispersion coefficients from observed data of single dilution tests. J. Hydrology, 1983, vol. 62. – P. 333-353.
16. Powell M.J.D. An efficient method for finding the minimum of a function of several variables without calculative derivatives. Computer J., 1964, vol. 7. – P. 155-162.

### АННОТАЦИЯ

Разработано методику решения обратных задач массопереноса по определению неизвестных параметров с использованием данных опытных работ за прослеживанием переноса индикаторных веществ в водонасыщенной пористой среде. Показано возможности обработки опытных данных по одиночным скважинам, что значительно снижает стоимость проведения полевых работ. Рекомендуются применение методики обработки данных на подтопленных территориях с неглубоким залеганием грунтовых вод от поверхности земли

Ключевые слова; массоперенос, диффузия, дисперсия, вещество – индикатор, обратная задача, численно-аналитические решения

### RESUME

The methodic of solution of the inverse problem of the mass transport for determination of the unknown parameters with using of the data of the experimental works for tracing of the transport of the indicator materials in the watersaturated porous media is developed. The possibility of the processing of the experimental data in the single wells that in a great extent reduce of the cost of the carrying out the experimental works is showed. The application of the methodic of the data processing on the submerged territories with undeeep position of the ground waters from arth surface is recommended

Key words: mass transport, diffusion, dispersion, material-indicator, inverse problem, numerical-analitic solutions