

К методике определения гидрогеологических параметров массопереноса в водоносных пластах

М. М. Гылыбов, П. П. Пенчев

Горно-геологический институт, 1156 София

M. Gylâbov, P. Penchev — To the methods of determination of hydrogeological parameters of mass transport in aquifers. A new general method for interpretation of tests with indicators and for determination of migration parameters is described. The method is based on the integral transformation of Laplas-Karson. All computations (including the images after Laplas-Karson and of the parameters) are computerized and a program CORM is proposed. An essential feature of the method is that the data of the test are processed simultaneously according to five different models (versions) of the convective mass transport taking into account one or other type of mass exchange processes. On the basis of respective quantitative criteria the theoretical model that corresponds best to the particular test is adopted. The method may be applied in interpretations both of laboratory and field experiments (in arbitrarily changing in time boundary condition of the "input"). Methodical recommendations are given for determination (analytical and numerical) of the images after Laplas-Karson using the CORM program.

Проблемы массопереноса (и теплопереноса) в подземных водах приобрели весьма существенное значение в связи с решением таких вопросов, как загрязнение и охрана подземных вод, засоление и рассоление орошаемых земель, фильтрационное выщелачивание некоторых полезных ископаемых, добыча геотермальной энергии и т. д. Теоретические проработки в этом направлении, хотя уже и немалочисленные, являются относительно новыми по сравнению с чисто фильтрационным исследованием. Решение прогнозных задач массо — теплопереноса требует определения некоторых специфических (миграционных) параметров — в основном, физикохимического и теплофизического характера. На методике их определения остановимся ниже.

О теоретических моделях массопереноса в фильтрационной среде

Дифференциальные уравнения массопереноса в подземных водах описываются (в разных модификациях) в ряде научных статей и книг. В теории и практике пока применяются в основном одномерные миграционные модели, для которых получены доступные для расчетов аналитические решения. Эти решения могут быть использованы и для более сложных, двумерных задач путем приведения их к одномерным — по отдельным лентам тока Мироненко и др., 1980; Transferts., 1975 и др.).

Однородная (гомогенная) фильтрационная среда

Уравнение конвективно-диффузионного массопереноса для условий большинства гидрогеологических задач можно записать (Бочеве́р и др., 1979; Беригин и Шержуков, 1969 и др.) в виде

$$(1) \quad D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} = n_0 \frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial M}{\partial t},$$

где: c — концентрация данного компонента в подземных водах; v — скорость фильтрации (в условиях установившегося или квазиустановившегося режима); n_0 — активная пористость пласта; D — коэффициент гидродисперсии, учитывающий суммарно эффект молекулярной и конвективной диффузии.

Член $\partial N/\partial t$ отражает кинетику сорбционных процессов, которые имеют первоочередное значение при миграции химических веществ в пласте. В природных условиях преобладает равновесная сорбция (Беригин и Шержуков, 1969; Гъльбов, 1981; Шестаков 1969 и др.), при которой

$$(2) \quad \frac{\partial N}{\partial t} = \kappa \frac{\partial c}{\partial t},$$

где κ — так называемый коэффициент распределения; N — сорбционная емкость среды.

Для несорбируемых компонентов $\kappa=0$, причем, чем больше сорбируемость компонента, тем больше значение κ .

Член $\partial M/\partial t$ отражает кинетику необратимого поглощения в тупиковых порах и в „застойных“ зонах порового пространства. В области за фронтом движения компонента этот член представляется так

$$(3) \quad \frac{\partial M}{\partial t} = \gamma c,$$

а далеко от этого фронта член $\partial M/\partial t$ практически аннулируется (Мироненко и др., 1980).

С учетом (2) и (3), уравнение (1) приобретает вид

$$(4) \quad D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} = n_e \frac{\partial c}{\partial t} + \gamma c,$$

где $n_e = n_0 + \kappa$ — т. наз. эквивалентная (приведенная) пористость.

Иногда, для упрощения задач пренебрегается дисперсия (рассеивание по фронту движения), т. е. принимается $D=0$, что отвечает известной схеме „поршневого вытеснения“.

Неоднородная (гетерогенная) фильтрационная среда

Рассматриваются обычно следующие два случая неоднородности:

а. Слоистый водоносный горизонт с конвективным переносом в хорошо проницаемых слоях и диффузионный вынос (поглощение) в прилегающих слабопроницаемых слоях;

б. Трещинно-пористый и трещинно-карстовый горизонты с конвективным переносом в основных системах трещин и диффузионным поглощением в блоках.

Математическая модель для обоих случаев очень близка (Бочеве́р и др. 1979; Рошал и Шестаков, 1969 и др.).

Дифференциальное уравнение представляется в виде

$$(5) \quad D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v \frac{\partial c}{\partial x} = n_e \frac{\partial c}{\partial t} + \gamma c - \frac{D_1}{m} \left(\frac{\partial c_1}{\partial z} \right)_{z=0} + \frac{D_2}{m} \left(\frac{\partial c_2}{\partial z} \right)_{z=m},$$

где: c — концентрация компонента в основном слое (в трещинах); c_1 и c_2 — концентрация того же компонента в кровле и подошве этого слоя (респ. в блоках, тогда $D_p=0$); m и v — мощность основного слоя и скорость фильтрации в нем; D_1 и D_2 — коэффициенты молекулярной диффузии в прилегающих слоях или в блоках.

Связь уравнений массопереноса с уравнениями теплопереноса

Известно, что процессы конвективно-кондуктивного теплопереноса в водоносных пластах описываются подобными дифференциальными уравнениями — типа (4)–(5), при следующих заменах физических величин: вместо концентрации c — температура воды θ ; вместо коэффициента гидродисперсии D — коэффициент термодисперсии D_T ; вместо эквивалентной пористости n_e — следующий комплексный параметр, характеризующий термемкостные свойства пласта:

$$(6) \quad n_e = n_0 + (1 - n_0) \frac{c_{ск} \rho_{ск}}{c_{ж} \rho_{ж}},$$

где: $c_{ж}$ и $c_{ск}$ — удельная теплоемкость жидкости и скелета породы; $\rho_{ж}$ и $\rho_{ск}$ — плотность жидкости и скелета породы; параметры D_1 и D_2 — коэффициенты кондуктивной термодиффузии прилегающих слоев (блоков).

Следовательно, представленная ниже методика определения параметров массопереноса применима и для интерпретации температурных наблюдений и экспериментов с целью определения теплофизических параметров водоносной системы.

Методика определения миграционных параметров

Общие положения

Определение параметров массопереноса (α , n_e , γ , D_1 , D_2 и т. д.) опирается в основном на существующие аналитические решения с использованием данных специальных миграционных опытов с индикаторами (трассерами). Сама постановка этих опытов в лабораторных и полевых условиях известна, и на ней останавливаться не будем.

Отметим, что аналитические решения довольно сложны и определение миграционных параметров из них иногда затруднительно, поскольку параметры содержатся в неявном виде — в аргументах некоторых специальных функций. Поэтому существующие методы расчета параметров исходят обычно из самых простых граничных условий — постоянная концентрация индикатора на „входе“ во время опыта ($c_0 = \text{const}$).

В последние годы авторами развивается (Г ъ л ъ б о в, 1979; Г ъ л ъ б о в и П е н ч е в, 1980; П е н ч е в, 1981) более общий подход к решению обратных миграционных задач, включающий следующие основные положения принципиального характера.

а. Использование операционных методов (прежде всего интегрального преобразование Лапласа — Карсона), предоставляющее такие преимущества, как возможность интерпретации опытов, проводимых при произвольном из-

менении граничного условия (входной концентрации); расчет параметров из решений в изображениях по Лапласу — Карсону, которые более просты чем решения в оригиналах.

б. Одновременная вариантная интерпретации данных опыта по разным теоретическим моделям и выбор оптимальной модели на основе соответствующих количественных критериев.

в. Всемирное использование ЭВМ на всех этапах вычислений.

В основе методики лежат решения уравнений (4) и (5) в изображениях по Лапласу — Карсону, которые имеют следующий вид:

для гомогенной среды

$$(7) \quad \frac{\bar{c}}{c_0} = \exp \left[\frac{x}{2} \left(\frac{v}{D} - \sqrt{\left(\frac{v}{D} \right)^2 + \frac{4\gamma}{D} + \frac{4n_e}{Dt_p}} \right) \right];$$

для гетерогенной среды (не имея в виду дисперсии)

$$(8) \quad \frac{\bar{c}}{c_0} = \exp \left[-\frac{\gamma x}{v} - \frac{n_e x}{vt_p} - \frac{Bx}{v \sqrt{t_p}} \right],$$

где: t_p — параметр интегрального преобразования размерностью времени; \bar{c}_0 и c — изображения по Лапласу — Карсону кривых концентрации на „входе“ (запускной скважине) $c_0(t)$ и на „выходе“ (реагирующей скважине) $c(t)$, установленные во время опыта; x — расстояние между входом и выходом (длина пути фильтрации). Остальные обозначения — как выше.

Параметр B отражает обобщенным образом диффузионный вынос и сорбцию в прилегающих слабопроницаемых слоях, респ. в блоках трещинно-блоковой среды. Он выражается так

$$(9) \quad B = \frac{1}{m} (\sqrt{D_1 n_{e1}} + \sqrt{D_2 n_{e2}}).$$

В (9): n_{e1} и n_{e2} — эквивалентная пористость обеих прилегающих слоев. Если кровля и подошва одинаковы ($D_1 = D_2$ и $n_{e1} = n_{e2}$), то

$$(10) \quad B = \frac{2\sqrt{D_1 n_{e1}}}{m}.$$

Последнее выражение относится и к трещинно-блоковой среде, причем m — характерный размер блоков.

Итак, основные миграционные параметры, подлежащие определению, следующие: в однородной среде — n_e (или n_0), γ , D ; в неоднородной среде — n_e (или n_0), γ , B .

Расчет параметров полагает сначала определение изображений \bar{c}_0 и \bar{c} . Они определяются по фактическим данным о концентрации на входе и выходе (c_0 и c) во время опыта. Методика их расчета коротко поясняется в приложении.

Расчет параметров

Уравнения (7) и (8) можно преобразовать в следующем виде:
для гомогенной среды

$$(11) \quad t_p \ln \frac{\bar{c}_0}{c} = \frac{xn_e}{v} + \frac{\gamma x}{v} t_p - \frac{D}{vx} t_p \ln^2 \frac{\bar{c}_0}{c},$$

для гетерогенной среды

$$(12) \quad t_p \ln \frac{\bar{c}_0}{c} = \frac{xn_e}{v} + \frac{\gamma x}{v} t_p + \frac{Bx}{v} \sqrt{t_p}.$$

Эти уравнения являются линейными уравнениями типа

$$(13) \quad y = a_0 + a_1 z_1 + a_2 z_2,$$

в которых переменная y — функция двух аргументов (z_1 и z_2), причем для обоих вариантов массопереноса имеем

$$(14) \quad y = t_p \ln \frac{\bar{c}_0}{c}; \quad z_1 = t_p,$$

а второй аргумент z_2 выражается так:

$$z_2 = t_p \ln^2 \frac{\bar{c}_0}{c} \quad (\text{для гомогенной среды})$$

$$z_2 = \sqrt{t_p} \quad (\text{для гетерогенной среды}).$$

Если для ряда заданных значений t_p вычислены изображения \bar{c}_0 и \bar{c} , респ. y , z_1 и z_2 , то по методам множественной регрессии можно определить непосредственно коэффициенты регрессии a_0 , a_1 и a_2 , а затем и миграционные параметры по простым формулам

$$(15) \quad n_e = a_0 \frac{v}{x},$$

$$(16) \quad \gamma = a_1 \frac{v}{x},$$

$$(17) \quad D = a_2 vx \quad (\text{гомогенная среда})$$

$$(18) \quad B = a_2 \frac{v}{x} \quad (\text{гетерогенная среда}).$$

Программная реализация описанной методики определения миграционных параметров

Эффективное применение изложенной выше методики интерпретации опытно-миграционных работ полагает широкое использование современных ЭВМ. С этой целью нами разработана специальная вычислительная программа CORM (компьютерная операционно-регрессионная модель). Она включает все вычислительные операции — определение изображений \bar{c}_0 и \bar{c} по фактическим данным опыта, аппроксимирование расчетных функций по методам регрессионного анализа (т. е. определение коэффициентов a_0 , a_1 , a_2) и расчет миграционных параметров n_e , γ , D , B . Данные эксперимента последовательно интерпретируются по пяти вариантам (моделям) конвективного массопереноса:

А. Перенос с учетом равновесной сорбции и необратимого задерживания по схеме поршневого вытеснения (т. е. $n_e \neq 0$, $\gamma \neq 0$, $D = 0$).

В. Перенос с учетом только равновесной сорбции и дисперсии ($n_e \neq 0$, $D \neq 0$, $\gamma = 0$).

С. Перенос с учетом сорбции, дисперсии и необратимого задерживания ($n_e \neq 0$, $D \neq 0$, $\gamma \neq 0$).

Д. Перенос в гетерогенной среде с пренебрежением дисперсии ($D=0$) и наличием диффузионного выноса в блоки ($D_{1,2} \neq 0$).

Е. Перенос в гетерогенной среде с пренебрежением дисперсии ($D=0$) и наличием необратимого задерживания ($\gamma \neq 0$) и диффузии в блоки ($D_{1,2} \neq 0$).

Сравнение „адекватности“ вариантов проводится путем вычисления критериев SSD (сумма квадратов отклонений) и R (коэффициент корреляции).

Компьютерная программа CORM разработана на FORTRAN IV и состоит из одной главной программы (MAIN) и четырех подпрограмм (модулей), а именно:

— подпрограмма TRLAPN (вычисляет изображения по Лапласу — Карсону);

— подпрограмма MULTR (аппроксимирует по методу множественной регрессии);

— подпрограмма READM (читает входные данные);

— подпрограмма SLE (решает систему линейных уравнений).

Координация модулей, вычисление миграционных параметров и печать всех текстовых комментариев и конечных результатов осуществляется главной программой MAIN. Обобщенный алгоритм программы CORM показан на табл. 1, откуда видна последовательность всех вычислительных операций в ходе интерпретации экспериментальных данных.

Программа CORM ориентирована на ЭВМ типа ЕС или IBM и выполняется всеми моделями, за исключением самых маленьких. Результаты решения печатаются в удобном виде, с подробными комментариями и могут быть непосредственно оформлены как приложения в гидрогеологических отчетах.

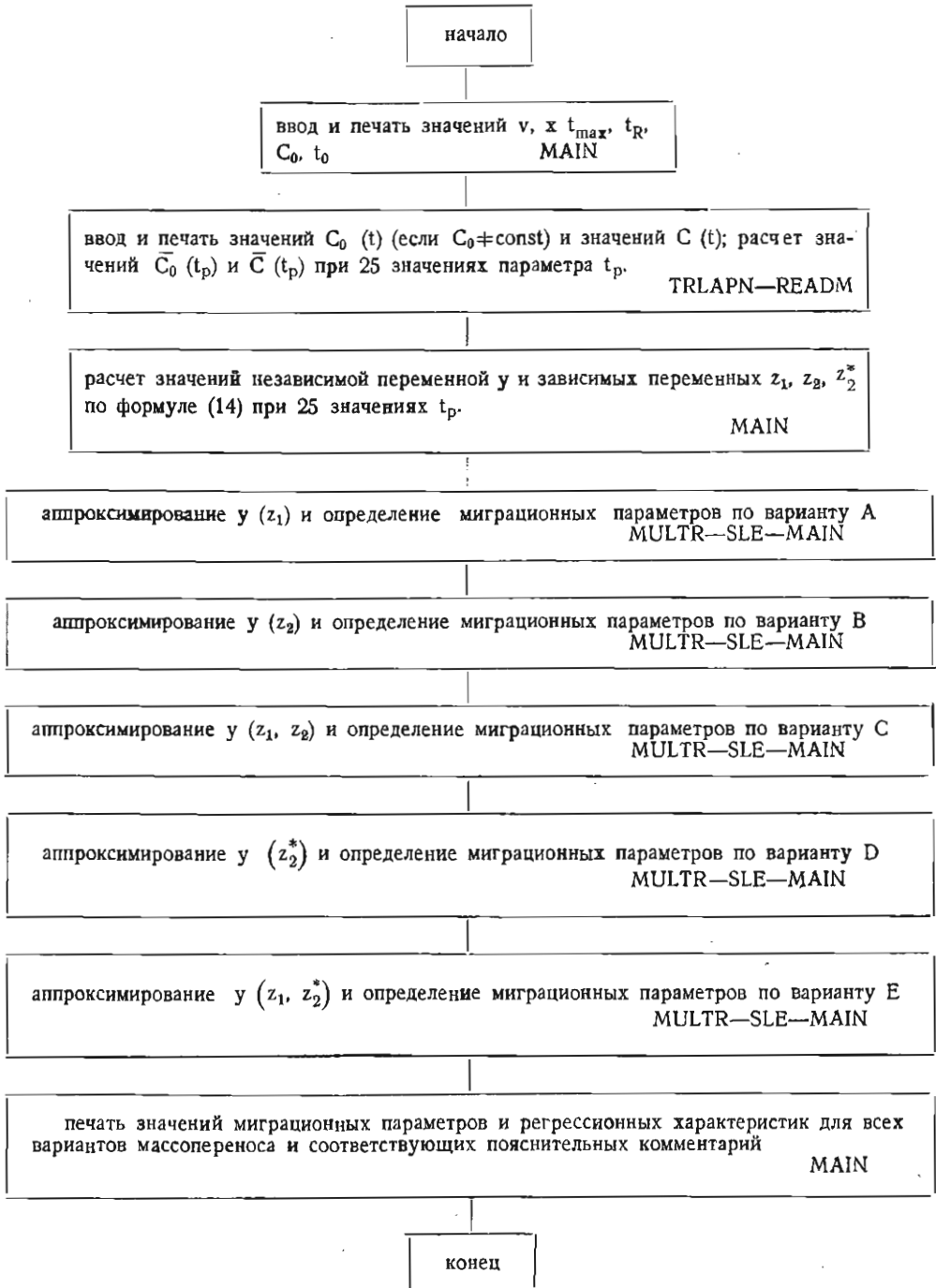
Заключительные примечания

1. Разработанная методика интерпретации данных миграционных опытов является довольно общей, не только из-за возможности учета переменности граничных условий, но и потому что она включает основную часть массообменных процессов (диффузия, сорбция, необратимое задерживание и др.). Если положить $D=0$, то переходим прямо на распространенную схему „поршневого вытеснения“; если $\gamma=0$, то следует популярный случай (Бочев и др. 1979; Гълъбов, 1981; Шестаков, 1979 и др.) — равновесная сорбция с дисперсией. Если в уравнениях для гетерогенной среды пренебречь необратимым задерживанием ($\gamma=0$) и положить $D_1=D_2$ и $n_{e1}=n_{e2}$, то это будет уже известная „схема Ловерье“ (Lauvergie, 1955), применяемая широко в исследовании тепло — массопереноса.

2. Методика применима для определения миграционных параметров по данным: а) лабораторных опытов в фильтрационных колонках; б) полевых запусков индикаторов в условиях естественного потока подземных вод (по линии тока); в) полевых запусков индикаторов в условиях откачки, т. е. в радиальном потоке (возмущающая и реагирующая скважины расположены опять по линии тока). В последнем случае v следует рассматривать как среднюю скорость фильтрации между обоими скважинами и определять ее по рекомендациям, приведенным нами (Гълъбов, 1981; Пенчев, 1981).

3. Большое достоинство представленной методики определения миграционных параметров с использованием ЭВМ заключается в освобождении специалистов от всех непосредственных (и громоздких) вычислений и в воз-

Обобщенный алгоритм компьютерной программы CORM



возможности многовариантной интерпретации результатов опыта. Кроме того, специалистам не обязательно знать в деталях методику. Им достаточно правильно провести эксперимент и подготовить как следует опытные данные для подачи в машину, а затем компетентно оценить полученные ЭВМ результаты.

4. По указанной методике с применением программы CORM было интерпретировано большое число миграционных опытов, проведенных как авторами (с Cl^- , NO_3^- , Mn^{2+} , PO_4^{2-} , ^{89}Br , ПАВ и др.), так и другими исследователями (с Cl^- , I^{31} , флуоресцеин). Эксперименты проводились как в рыхлых отложениях (аллювиальные галечники, пески и супессы), так и в трещинно-карстовых породах (сарматские известняки, среднетриассовые доломиты). С ее помощью нами интерпретированы также результаты лабораторных опытов по теплопереносу в несвязных грунтах. Программа CORM проверялась и на многочисленных тестовых примерах, которые показали ее эффективность и экономичность с точки зрения машинного времени.

Все это позволяет считать, что разработанная компьютерная методика определения параметров массо — теплопереноса найдет широкое применение в гидрогеологических исследованиях, тем более что в последние годы почти все проектные и изыскательские организации имеют в распоряжение современные ЭВМ.

Приложение

О расчете изображений по Лапласу — Карсону

Вопрос об определении интегральных изображений при преобразовании Лапласа — Карсона рассмотрен довольно подробно в специальной литературе по математике. Не останавливаясь на нем в целом, отметим лишь применимость двух способов расчета — аналитического и численного. Первый из них полагает аналитическое выражение функции $f(t)$ известным, и изображение ее $\bar{f}(t_p)$ получается прямым интегрированием по формуле преобразования. На этой основе в литературе разработаны подробные таблицы интегральных изображений по Лапласу — Карсону. Второй подход полагает численное интегрирование фактической кривой, причем используются разные методы: метод механической квадратуры, метод уклонов и метод трапеции.

Ниже поясним только те методы, которые нами используются для расчета изображений \bar{c}_0 и \bar{c} и которые заложены в компьютерной программе CORM.

Напомним, что изображения \bar{c}_0 и \bar{c} определяются по фактическим кривым концентрации на „входе“ и „выходе“ $c_0(t)$ и $c(t)$ (рис. 2), которые в общем случае могут быть произвольными.

Аналитическое вычисление изображений \bar{c}_0 и \bar{c} основывается на аппроксимации реальных кривых $c_0(t)$ и $c(t)$ степенным полиномом типа (Пенчев, 1981)

$$(П.1) \quad c_0(t) = \sum_{i=0}^n A_i t^i,$$

$$(П.2) \quad c(t) = \sum_{i=0}^n B(t - t_R)^i,$$

где: A_i , B_i — коэффициенты полиномов, определяемые по методам регрессионного анализа; t — время от начала запуска индикатора; t_R — время запаздывания (время до начала реагирования, т. е. до появления индикатора на „выходе“) (рис. 1).

Уравнениями типа (П.1) и (П.2) можно описать с любой точностью реальные кривые $c_0(t)$ и $c(t)$. Практически, хорошая точность достигается первыми несколькими членами ($n < 10$).

Изображения функций (П.1) и (П.2) имеют следующий вид:

$$(П.3) \quad \bar{c}_0 = \sum_{i=0}^n i! A_i t_p^i,$$

$$(П.4) \quad \bar{c} = e^{-t_R/t_p} \sum_{i=0}^n i! B_i t_p^i.$$

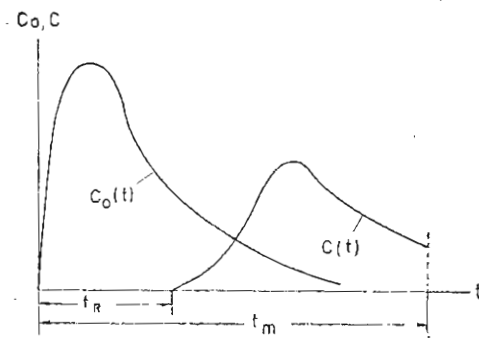


Рис. 1. Кривые концентрации: $C_0(t)$ — на „входе“ (пусковой скважине); $C(t)$ — на „выходе“ (реагирующей скважине)

Отметим, что общие формулы (П.1) — (П.4) включают и частные случаи: а) непрерывный ввод индикатора с постоянной концентрацией ($c_0 = \text{const}$, респ. $\bar{c}_0 = c_0$) и б) импульсный ввод с постоянной концентрацией c_0 в течении времени t_0 . В этом случае $\bar{c}_0 = c_0(1 - e^{-t_0/t_p})$.

Численное определение изображений \bar{c}_0 и \bar{c} осуществляется по „методу уклонов“. В общем случае изображение выходной кривой $c(t)$ можно рассчитать по формуле (Гылыбов и Пенчев, 1980)

$$(П.5) \quad \bar{c} = e^{-t_R/t_p} \left[c(t_R) + t_p \sum_{i=1}^{m-1} \frac{c_{i+1} - c_i}{t_{i+1}^* - t_i^*} (e^{-t_i^*/t_p} - e^{-t_{i+1}^*/t_p}) \right],$$

где: t_R — время от начала запуска до начала реагирования (рис. 1); $t_i^* = t_i - t_R$; m — число табличных значений функции $c(t)$, т. е. число определений выходной концентрации во время опыта; $c(t_R)$ — концентрация в моменте t_R , которая при нулевых начальных условиях равна нулю — $c(t_R) = 0$. При $t_R = 0$, т. е. для входной концентрации c_0 , считая еще $c(t_R) = 0$, имеем

$$(П.6) \quad \bar{c} = t_p \sum_{i=1}^{m-1} \frac{c_{i+1} - c_i}{t_{i+1} - t_i} (e^{-t_i/t_p} - e^{-t_{i+1}/t_p}).$$

Важным вопросом является выбор значений параметра преобразования t_p при расчете \bar{c} и \bar{c}_0 . На основе ряда тестовых задач было установлено, что для обеспечения хорошей точности необходимо задавать t_p в пределах

$$(П.7) \quad 0,05 t_m^* < t_p < 0,125 t_m^*,$$

где t_m — общая длительность расчетного периода, т. е. периода, в течении которого замерялись концентрации $c_0(t)$ и $c(t)$, используемых для расчета; $t_m^* = t_m - t_R$.

Л и т е р а т у р а

- Бочевер Ф. М., Н. Н. Лапшин, А. Е. Орадовская. 1979. *Защита подземных вод от загрязнения*. М., Недра. 254 с.
- Вергин Н. Н., Б. С. Шержуков. 1969. Диффузия и массообмен при фильтрации жидкостей в пористых средах. В кн. *Развитие исследований по теории фильтрации в СССР*. М., Недра, 237—313.
- Гылыбов М. М. 1979. Миграция загрязнителей в водоносном пласте при переменной интенсивности загрязнения на границе. — *Wissensch. Konferenz „Simulation der Migrationprozesse im Boden- und Grundwasser“*. TU Dresden, 94—100.
- Гъльбов М. М. 1981. *Динамика на подземните води*. С., Техника. 378 с.
- Гъльбов М. М., П. П. Пенчев. 1980. Отчет по дог. 677, етап Р.1.1., Геофонд НИС-ВМГИ. 22 с.
- Мироненко В. А., В. Г. Румынин, В. К. Учаев. 1980. *Охрана подземных вод*. Л., Недра. 320 с.
- Пенчев П. П. 1981. Операционно-регрессионен модел за интерпретация на експерименталните изследвания върху масопресянето в подземните води. С., Автореферат канд. дис. 30 с.
- Рошаль А. А., В. М. Шестаков. 1969. О миграции подземных вод в слоистых пластах. — *Тр. ВСЕГИНГЕО*, 14, 43—55.
- Шестаков В. М. 1969. О кинетике сорбции на грунтах. — *Тр. ВСЕГИНГЕО*, 14, 23—34.
- Шестаков В. М. 1973. *Динамика подземных вод*. М., Изд. МГУ. 334 с.
- Laugier H. A. 1955. The transport of heat in an oil layer caused by the injection of fluid. — *Appl. Sci. Res., sect. A*, 5, 145—150.
- Transferts thermiques dans les aquifères*. 1975. *Bull. BRGM, sect. III*, No 1.

(Постъпила на 10. X. 1983 г.)