УДК 519.87:004.421.2:(556.332:550.42)

А. Б. Ситников

ОБОСНОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ СОВМЕСТНОЙ МИГРАЦИИ ВЛАГИ И ЛЕГКИХ НЕФТЕПРОДУКТОВ В НЕНАСЫЩЕННО-НАСЫЩЕННЫХ ГРУНТАХ

Викладені основні методичні положення математичного моделювання сумісної міграції рідких водних розчинів та легких нафтопродуктів типу керосину, бензину тощо у ненасичено-насичених грунтах приповерхневого шару землі. Рекомендована система диференціальних рівнянь, що враховують одно-, двовимірний у розрізі несталий переважно конвективний рух (адвекцію) двох рідин, які не змішуються, підпорядкований нелінійному закону змін об'ємних вологовмістів та коефіцієнтів переносу речовин з урахуванням зміни внутрішньогрунтових джерел масообміну. Запропоновані ефективні ітераційні прогнозні формули, що забезпечують з необхідною точністю стале рішення вихідної системи міграційних рівнянь.

The principal methodical grounds of the mathematical modeling of common migration for liquid aqueous solutions and light oil products such as kerosene, petrol, etc. into undersaturated-saturated soils at the subsurface layer are presented. More accurately the system of differential equations taking into account un-steady prevalent convective one- and two-dimensional movement (advection) for two immiscible liquids obeyed non-linear change law of volumetric moisture contents and matter transfer coefficients with the variation of intra-soil mass exchange sources are recommended. The effective iterative prediction formulae providing the stable solution of the initial system of the migration equations with the required accuracy are proposed.

В работах [6–8] рассмотрены некоторые проблемные вопросы, связанные с математическим моделированием состояния двух несмешивающихся жидкостей, а также одно-, двухмерной и осесимметричной нелинейной миграции жидкой влаги (точнее, подземного водного раствора) в насыщенно-недонасыщенных водой грунтах, для реализации которой предложена эффективная численная прогнозная компьютерная программа. Внимательно ознакомившись с работами [2, 4, 5, 11], особенно с [5], где тщательно проанализирован современный мировой уровень научных достижений, мы пришли к выводу, что необходимы разработки более совершенных и пригодных для количественного прогнозирования математических моделей нелинейной совместной миграции влаги и легких нефтепродуктов в грунтах, учитывающих главенствующие механизмы (законы) состояния этих жидкостей.

Для удобства ограничимся двухмерной в разрезе миграцией, представив *исходные математические модели (систему дифференциальных уравнений)* в следующем виде:

$$\frac{\partial W_p \cdot \left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)}{\partial t} = \gamma_p \frac{\partial W_p}{\partial \overline{p}_{вс}} \cdot \frac{\partial \overline{\Phi}_p}{\partial t} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial z}\left[K_p \cdot \left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right) \cdot \frac{\partial \overline{\Phi}_p}{\partial z}\right] + \frac{\partial}{\partial x}\left[K_p \cdot \left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right) \cdot \frac{\partial \overline{\Phi}_p}{\partial x}\right] + J_p = 0,$$

$$\frac{\partial W_i \cdot \left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)}{\partial t} = \gamma_i \frac{\partial W_i}{\partial p_{изб}} \cdot \frac{\partial \Phi_i}{\partial t} =$$

$$= \frac{\partial}{\partial z}\left[K_i (W_i) \frac{\partial \Phi_i}{\partial z}\right] + \frac{\partial}{\partial x}\left[K_i (W_i) \frac{\partial \Phi_i}{\partial x}\right] + J_i = 0,$$

$$K_i = \frac{\nu_p}{\nu_i} K_p (W_i), \quad J_p = \sum_1^N (J_p)_j, \quad J_i = \sum_1^N (J_i)_i,$$

$$W_{пол} = W_p + W_i + W_{возд}, \quad W_j = \frac{\delta V_j}{\delta V_{гр}},$$

$$\overline{\Phi}_p = \frac{\overline{p}_{вс}}{\gamma_p} + z, \quad \Phi_i = \frac{p_{изб}}{\gamma_i} + z, \quad \gamma_p \ge \gamma_i,$$

$$\overline{p}_{вс} = p_{вс} + p_{изб}, \quad p_{вс} = p_p - p_{атм}, \quad p_{изб} = p_i - p_{атм},$$

$$p_{атм} - \text{const},$$

где t, z, x – временная и пространственные координаты, сут, м; W – обобщенное нелинейное относительное объемное содержание, доли; K – обобщенный нелинейный коэффициент переноса, м/сут; J – внутренние источники массоизменения жидких сред, 1/сут; Φ – специальная функция, м; $p_{вс}$, $p_{изб}$ – так называемые всасывающее и избыточное давления соответственно жидкого водного раствора (влаги) и жидкого нефтепродукта, кПа; g – ускорение силы тяжести, м/с^2; γ – объемный вес, равный $\gamma = \rho g$, Н/м^3; ρ – плотность, кг/м^3; ν – кинематическая вязкость, м^2/с; $\bar{p}_{вс}$ – избыточное давление (без атмосферного) влаги, учитывающее воздействие со стороны жидкого нефтепродукта, кПа; индексы указывают на: р – жидкую влагу (раствор), гр – грунт, пол – пористость или полное насыщение грунта жидкостями, возд – воздух, δ – компетентное значение, вс – всасывающее давление, атм – атмосферное давление, i – вид гомогенной среды.

По существу, разрабатываемая математическая модель является более общим случаем по сравнению с математической моделью только влагопереноса. Обратим внимание, что градиенты функций $\bar{\Phi}_р$ и Φ_i являются движущими силами, в то время как не $\bar{p}_{вс}$, а $p_{вс}$ определяет нелинейные параметры состояния жидкой влаги.

Вывод приведенных уравнений в идеальном случае предусматривает ряд основных допущений, из которых практически ощутимыми могут оказаться следующие: деформирующаяся среда; несмешиваемость исследуемых жидкостей; безгистерезисный характер исходных параметров; постоянство плотностей и вязкостей; незначительная роль диффузии и воздушного массообмена при превалирующем конвективном переносе (адвекции жидкостей); сферическая (корпускулярная) структура пористой среды (грунта); наступление так называемого гидростатического равновесия между жидкостями за прогнозный период времени; вода – более смачиваемая жидкость, чем нефтепродукт. Несомненно, описываемая миграция является весьма сложным и недостаточно изученным процессом, тем более in sito in natura. На современном уровне с учетом достоверности исходной информации для ее изучения целесообразно применить методы разрабатываемой нами концепции об оптимистических и пессимистических решениях.

Предполагается учет, во-первых, чистой влаги, во-вторых, жидкого водного раствора углеводородов.

Необходимо учитывать некоторые **дополнительные условия:**

1.1. Когда $p_{вс} < 0$, $p_{изб} < 0$, а $\frac{p_{вс}}{\gamma_р} < \frac{p_{изб}}{\gamma_р}$,

то $W_i = W_р\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_р}\right) - W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right)$, $W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right)$,

$$K_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right),\ K_i\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right) = \frac{\nu_р}{\nu_i} K_р\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right).$$

1.2. Когда $p_{вс} < 0$, $p_{изб} < 0$, а $\frac{p_{вс}}{\gamma_р} > \frac{p_{изб}}{\gamma_р}$,

то $W_i = 0$, $K_i = 0$, $W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right)$, $K_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right)$.

2.1. Если $p_{вс} < 0$, $p_{изб} \geq 0$,

то $W_i = W_{пол} - W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right)$,

$$K_i = \frac{\nu_р}{\nu_i} K_р\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right),\ W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right),\ K_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right).$$

2.2. Если $p_{вс} < 0$ и $W_i = 0$, то при отсутствии жидкого легкого нефтепродукта

$$W_{возд} = W_{пол} - W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right),$$

$$W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right),\ K_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right),\ K_i = 0.$$

3. Если $p_{вс} \geq 0$, то $W_i = 0$, $\frac{\bar{p}_{вс}}{\gamma_р} = \frac{p_{вс}}{\gamma_р}$,

$$W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right) = W_{пол},\ K_i = 0,\ K_р(W_{пол}),$$

т. е. $\frac{p_{вс}}{\gamma_р} = 0$.

Для реализации исходной математической модели совместной миграции влаги и легких нефтепродуктов необходимы *обобщенные нелинейные зависимости* с учетом полного насыщения жидкостей

$W_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right)$, $K_р\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_р}\right)$; значит, известны

$$D_p\left(\gamma_p \frac{\partial W_p}{\partial p_{вс}}\right) \text{ и } K_p\left[W_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)\right].$$

Ныне имеются многочисленные аналитические и эмпирические расчетные формулы, а также лабораторные и натурные определения указанных нелинейных параметров для разных типов грунтов. Достоверность их применения обычно ограничивается субъективным мнением исследователей, т. е. не учитывающих хотя бы 5-критериальную предлагаемую нами оценку их достоверности (физико-химическую сущность и определенность, детерминизм, компетентные объемы (времена) образцов и датчиков, погрешность опытных определений, контролируемые ошибки собственно прогнозных вычислительных операций). Конечно, прежде всего мы доверяем нашим исследованиям, в частности основанным на корпускулярно-структурном представлении грунтов [11]. Хотя, несомненно, правомочно использовать параметры также иных авторов, особенно [1, 5]. Характерные значения для разных типов грунтов, приведенные по данным работ [1, 9], представлены в таблице.

Согласно принятым допущениям, этими зависимостями можно ограничиться, используя *переходные коэффициенты* для расчета, в том числе $W_i\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)$ и K_i (W_i), полученные на основании некоторых законов. Так, по закону Лапласа [4, 6] в недонасыщенных водой и нефтепродуктами грунтах для чистой воды

$$p_{вс} = (p_{вс})_{1.3} = p_p - p_{атм} = -\frac{2\,\sigma_{1.3}\cdot\cos\,\theta}{(r_{тв})_{эф}},$$

$$(p_{вс})_{2.3} = \overline{p}_{вс} - p_{изб} = \overline{p}_p - p_{атм} - p_i + p_{атм} =$$

$$= -\frac{2\,\sigma_{2.3}\cdot\cos\,\theta}{(r_{тв})_{эф}} = \frac{\sigma_{1.3}-\sigma_{1.2}}{\sigma_{1.3}}\cdot p_{вс},$$

а для нефтепродуктов $p_{изб} = p_i - p_{атм} =$

$$= -\frac{2\,\sigma_{1.2}\cdot\cos\,\theta}{(r_{тв})_{эф}} = \frac{\sigma_{1.2}}{\sigma_{1.3}}\cdot p_{вс}.$$

Поверхностное натяжение может изменяться в результате частичного растворения углеводородов и адсорбции их водой. Тогда

$$(p_{вс})_{1.4} = \frac{2\,\sigma_{1.4}\cdot\cos\,\theta}{(r_{тв})_{эф}} = \frac{\sigma_{1.4}}{\sigma_{1.3}}\cdot p_{вс},\quad (p_{вс})_{2.4} =$$

$$= (\overline{p}_{вс}) - p_{изб} = \frac{2\,\sigma_{2.4}\cdot\cos\,\theta}{(r_{тв})_{эф}} = \frac{\sigma_{2.4}}{\sigma_{1.3}}\cdot p_{вс}.$$

Отсюда при равенстве размеров твердых частиц имеем:

$$p_{вс} = (p_{вс})_{1.3} = \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{1.2}}\cdot(p_{изб})_i = \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{1.4}}(p_{вс})_{1.4} =$$

$$= \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{2.3}}(p_{вс})_{2.3} = \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{1.3}-\sigma_{1.2}}(p_{вс})_{2.3} =$$

$$= \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{2.4}}(p_{вс})_{2.4} = \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{1.4}-\sigma_{1.2}}(p_{вс})_{2.4}.$$

В предыдущих двух абзацах использованы такие обозначения: $(r_{тв})_{эф}$ – радиус характерных твердых частиц, м; θ – так называемый угол смачивания, град; σ – поверхностное натяжение на границе разных сред, Н/м; 1 – воздух, 2 – жидкий легкий нефтепродукт, 3 – жидкая чистая вода, 4 – жидкий водный раствор.

Для кварца и других гидрофильных частиц грунта при наличии в нем только жидкой воды или воды совместно с жидким нефтепродуктом угол смачивания стремится к нулю, т. е. реально равен 1 [4]. Вода – более смачиваемая жидкость, чем углеводороды; поэтому ей принадлежит первостепенная роль, тем более, что нефтепродукты легче нее.

Не трудно убедиться, что при равенстве размеров частиц грунта, в том числе отсутствии деформации грунта, $\sigma_{2.3} + \sigma_{1.2} = \sigma_{1.3}$, $\sigma_{2.4} + \sigma_{1.2} = \sigma_{1.4}$, что позволяет определять одно из указанных поверхностных натяжений по двум известным остальным. Кроме того, при $\beta_1 = \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{1.4}}$, $\beta_2 = \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{1.2}}$, $\beta_3 = \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{2.3}}$, $\beta_4 = \frac{\sigma_{1.3}}{\sigma_{2.4}}$

следует $\beta_1\cdot\sigma_{1.4} = \beta_2\cdot\sigma_{1.2} = \beta_3\cdot\sigma_{2.3} = \beta_4\cdot\sigma_{2.4}$.

В работе [5] изложенное подтверждается на основании несколько иного доказательства, а также закона Юнга [2–4]. Таким образом, исходя из того, что каждому $\frac{p_{вс}}{\gamma_p}$ однозначно соответствует значение

$$W_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right) \text{ и } K_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right),$$

Обобщенные нелинейные параметры фильтрации и влагопереноса [1, 8, 9]

$\frac{P_{вс}}{\gamma_р}$, м	≥ 0,00	−0,50	−1,00	−1,50	−2,00	−2,50	−3,00	−3,50	−4,00	−4,50	≤ −5,00	
j	11	10	9	8	7	6	5	4	3	2	1	
Песок												
$W_р(P_{вс})$, доли	0,340	0,280	0,050	0,040	0,030	0,020	0,020	0,020	0,010	0,010	0,010	
$K_р(P_{вс})$, м/сут	5,0	1,0	0,007	0,0001	0,00008	0,00007	0,00005	0,00005	0,00003	0,00001	0	
Д($P_{вс}$), 1/м	0,00	0,12	0,46	0,02	0,02	0,02	0	0	0,02	0	0	0
b	0,340	0,340	0,51	0,07	0,07	0,07	0,02	0,02	0,09	0,01	0,01	0,01
Суглинок легкий												
$W_р(P_{вс})$, доли	0,450	0,440	0,400	0,300	0,250	0,220	0,200	0,190	0,180	0,170	0,170	
$K_р(P_{вс})$, м/сут	0,50	0,050	0,010	0,008	0,0006	0,0003	0,0002	0,0001	0,00008	0,00006	0,00005	
Д($P_{вс}$), 1/м	0,00	0,02	0,08	0,2	0,1	0,06	0,04	0,02	0,02	0,02	0	0
b	0,445	0,445	0,480	0,60	0,45	0,37	0,320	0,260	0,260	0,260	0,170	0,17
Глина (тяжелый суглинок)												
$W_р(P_{вс})$, доли	0,375	0,370	0,365	0,355	0,345	0,335	0,325	0,315	0,310	0,290	0,280	
$K_р(P_{вс})$, м/сут	0,010	0,002	0,0005	0,0003	0,0002	0,00015	0,00012	0,0001	0,00005	0,00002	0	
Д($P_{вс}$), 1/м	0,00	0,010	0,010	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	0,020	0	0
b	0,375	0,375	0,375	0,385	0,385	0,385	0,385	0,385	0,385	0,395	0,280	0,29

согласно приведенным формулам можно оценить $W_i\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)$, а также $K_i\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)$, используя, в частности, кинематические вязкости жидкостей, т. е. $K_i = \frac{\nu_p}{\nu_i} K_p(W_p)$.

Несколько слов о *внутригрунтовых источниках массоизменения жидкой влаги и жидких углеводородов.* Для жидкой влаги под таким источником J_p подразумеваем внутригрунтовое испарение (конденсацию) влаги (т. е. фазовое преобразование), отбор корнями растений, растворение углеводородов из воздуха и непосредственно из жидких углеводородов и другие изменения, свойственные жидкому подземному водному раствору [7–9]. Массоизменение жидкого нефтепродукта предусматривает учет интенсивности распада в результате химических и биологических процессов, интенсивность испарения, а также растворимость нефтепродукта в воде. Мы вполне согласны с методическими рекомендациями И. С. Пашковского и Д. В. Коннова [5] по учету внутригрунтового источника массоизменения, так как это соответствует современным требованиям и исходным информативным данным.

Начальные условия представляются в виде специальных функций $\overline{\Phi}_p^{\tau}$ (0, x, z) и Φ_i^{τ} (0, x, z) в каждой внутренней точке моделируемого пространства. τ – дискретная начальная временная координата. *Граничные условия* – это собственно указанные функции Φ_p и Φ_i, заданные на границе расчетного объекта или внутри него, т. е. I рода, действующие в прогнозный период, либо II рода – в виде постоянных расходов жидких влаги и легких нефтепродуктов, заданных на границе изучаемого объекта или в особых внутренних точках. Кроме граничных условий I и II родов, по сути учитывающих влияние природно-техногенной среды вне изучаемого объекта, иногда необходимо учитывать специфические граничные условия III рода, в частности высоту высачивания воды. Более подробно о последних граничных условиях для жидкой влаги сказано в работе [8]. Есть смысл подобным образом интерпретировать их учет для жидкого нефтепродукта, хотя, судя по достоверности учета таких граничных условий III рода, целесообразно ограничиться граничными условиями I и II родов.

Подытоживая изложенное, исходя из проведенных нами исследований [8], отметим, что при вышеуказанных начальных и граничных условиях, а также достоверных нелинейных параметрах есть возможность обосновать расчетные схемы решения исходной системы дифференциальных уравнений совместной миграции жидких влаги и легких нефтепродуктов. При этом можно добиться устойчивого и сходимого пространственно-временного решения по определению неизвестных функций $\overline{\Phi}_p$ и Φ_i для одномерной и двухмерной миграции. По-видимому, технические возможности современных компьютеров типа IBM-486 пока не позволяют учесть реальную трехмерную миграцию.

Конечноразностная аппроксимация исходных уравнений по неявной расчетной схеме, $\Delta t = (t^{\tau+1} - t^{\tau})$ – const, $\Delta z = (z_{z+1} - z_z)$ – – const, $\Delta x = (x_{i+1} - x_i)$ – const, γ_p, $\gamma_к$ – const, однотипна для жидкого водного раствора и жидкого углеводорода, поэтому ограничимся лишь аппроксимацией уравнения влагопереноса:

$$\frac{(W_{z,i}^{\tau+1} - W_{z,i}^{\tau})\cdot \Delta x \cdot \Delta z}{t^{\tau+1} - t^{\tau}} = \gamma_p \left(\frac{\partial W_p}{\partial p_{вс}}\right)_{z,i}^{\tau+1} \times$$

$$\times \frac{(\overline{\Phi}_{z,i}^{\tau+1} - \overline{\Phi}_{z,i}^{\tau})\cdot \Delta x \cdot \Delta z}{t^{\tau+1} - t^{\tau}} = K_{z+1/2,i}^{\tau+1} \frac{(\overline{\Phi}_{z+1,i}^{\tau+1} - \overline{\Phi}_{z,i}^{\tau+1})\cdot \Delta x}{\Delta z} -$$

$$- K_{z-1/2,i}^{\tau+1} \frac{(\overline{\Phi}_{z,i}^{\tau+1} - \overline{\Phi}_{z-1,i}^{\tau+1})\cdot \Delta x}{\Delta z} +$$

$$+ K_{z,i+1/2}^{\tau+1} \frac{(\overline{\Phi}_{z,i+1}^{\tau+1} - \overline{\Phi}_{z,i}^{\tau+1})\cdot \Delta z}{\Delta x} -$$

$$- K_{z,i-1/2}^{\tau+1} \frac{(\overline{\Phi}_{z,i+1}^{\tau+1} - \overline{\Phi}_{z,i}^{\tau+1})\cdot \Delta z}{\Delta x} + J_{z,i}\cdot \Delta x \cdot \Delta z,$$

где $\tau+1$, τ, z, i – дискретные временная (конечное и начальное значения) и пространственные координаты; $z\pm1/2$, $i\pm1/2$ – индексы, указывающие на значение величин посредине между расчетными точками; j+1, j – индексы, указывающие на дискретность исходного параметра; Δt, Δz, Δx – соответственно прогнозный временной интервал, вертикальный и горизонтальный шаги расчетной сетки, сут, м.

Зависимость $D_p = \dfrac{W_j - W_{j+1}}{(p_{вс})_j - (p_{вс})_{j+1}}$ представляет собою tg угла наклона касательной к исходной нелинейной зависимости относительного объемного влагосодержания от избыточных давлений. Реально эту функцию можно оценивать кусочно-постоянно, так как основная исходная зависимость $W_p\left(\dfrac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)$ задается в виде минимум 10 дискретных точек (j), между которыми предусматривается постоянство функции D_p, из-за линейного поведения функции.

Коэффициент обобщенного влагопереноса при полном насыщении (фильтрации) и неполном насыщении (собственно влагопереносе) определяется согласно заданной исходной зависимости $K_p\left(\dfrac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)$ по среднему определяемому значению всасывающего давления между расчетными точками, т. е. в частности по $\left[\left(\dfrac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)_{z+1,i} + \left(\dfrac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)_{z,i}\right]\cdot 0{,}5$. В то же время коэффициент переноса жидкого легкого нефтепродукта определяется, используя основную зависимость $K_p(W_p)$, как $K_i = \dfrac{\nu_p}{\nu_i} K_i\,(W_i)$, где $W_i = W_p$ является средним прогнозным объемным содержанием между расчетными точками, в частности $K_i = \dfrac{\nu_p}{\nu_i} K_p\left[\dfrac{(W_i)_{z+1,i} + (W_i)_{z,i}}{2}\right]$, или средним коэффициентом между расчетными точками, т. е. $K_i = [(K_i)_{z+1,i} + (K_i)_{z,i}]\cdot 0{,}5$;

либо $$K_i = \frac{\nu_p}{\nu_i}\cdot K_p\left[\frac{\left(\dfrac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)_{z+1,i} + \left(\dfrac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)_{z,i}}{2}\right].$$

Напомним, что искомые параметры определяются в соответствии с ранее отмеченными дополнительными условиями. В частности, согласно условию 1.1

$$(W_i)_{z,i} = W_p\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_p}\right)_{z,i} - W_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)_{z,i}.$$

Приведенная конечноразностная аппроксимация исходных нелинейных миграционных уравнений методически устойчивая для решения. На это указывают результаты реализации на аналоговой разработанной нами вычислительной машине типа АВНУ нелинейного влагопереноса, а также численные решения на компьютере типа IBM, основанные на использовании ряда итерационных явных схем [8]. Как наиболее упрощенные и надежные нами предлагаются следующие **формулы на расчетный период времени** при n = 1, 2, 3, ..., N (где n – номер итерации):

$$(\overline{\Phi}_p^{\tau+1})^n_{z,i} = \frac{C_p^{n-1} + H_p^{n-1} + B_p}{E_p^{n-1} + M_p^{n-1}},$$

$$(\Phi_i^{\tau+1})^n_{z,i} = \frac{C_i^{n-1} + H_i^{n-1} + B_i}{E_i^{n-1} + M_i^{n-1}},$$ а также желательно

$$(\overline{\Phi}_p^{\tau+1})^n_{z,i} = \frac{C_p^{n-1} - L_p^{n-1} + B_p}{E_p^{n-1}},$$

$$(\Phi_i^{\tau+1})^n_{z,i} = \frac{C_i^{n-1} - L_i^{n-1} + B_i}{E_i^{n-1}},$$

где $$C_{z,i}^{n-1} = K_{z+1/2,i}^{n-1}\cdot\Phi_{z+1,i}^{n-1} + K_{z-1/2,i}^{n-1}\cdot\Phi_{z-1,i}^{n-1} +$$

$$+ K_{z,i+1/2}^{n-1}\cdot\Phi_{z,i+1}^{n-1} + K_{z,i-1/2}^{n-1}\cdot\Phi_{z,i-1}^{n-1},$$

$$E_{z,i}^{n-1} = K_{z+1/2,i}^{n-1} + K_{z-1/2,i}^{n-1} + K_{z,i+1/2}^{n-1} + K_{z,i-1/2}^{n-1},$$

$$H_{z,i}^{n-1} = D_{z,i}^{n-1}\cdot\Phi_{z,i}^{\tau}\cdot\frac{\Delta x\cdot\Delta z}{\Delta t},\quad M_{z,i}^{n-1} = D_{z,i}^{n-1}\cdot\frac{\Delta x\cdot\Delta z}{\Delta t},$$

$$B_{z,i} = J_{z,i}\cdot\Delta z\cdot\Delta x,\quad L_{z,i}^{n-1} = [(W_{z,i}^{\tau+1})^{n-1} - W_{z,i}^{\tau}]\cdot\frac{\Delta x\cdot\Delta z}{\Delta t}.$$

Итерационные действия за период $\Delta t = t^{\tau+1} - t^{\tau}$ считаются законченными при условии, что $(\overline{\Phi}_p^{\tau+1})^{N-1}_{z,i} - (\overline{\Phi}_p^{\tau+1})^{N}_{z,i} \le \xi_p$, $(\overline{\Phi}_i^{\tau+1})^{N-1}_{z,i} - (\overline{\Phi}_i^{\tau+1})^{N}_{z,i} \le \xi_i$, т. е. принимаем $(\overline{\Phi}_p^{\tau+1})_{z,i} = (\overline{\Phi}_i^{\tau+1})^N$, $(\Phi_i^{\tau+1})_{z,i} = (\Phi_i^{\tau+1})^N$. Подробнее см. работы [7, 8].

Кстати, при n = 1 получим n –1 = 0, что указывает на нулевую итерацию, т. е. по существу на начальные исходные данные для 1-й прогнозной итерации. Количество расчетных действий за один итерационный цикл равно количеству заданных расчетных точек. Обычно итерационная прогонка осуществляется слева направо по строке, далее сверху вниз по столбцу. Для более надежной первичной обработки исходных нелинейных параметров желательно предугадать наибольший диапазон изменений W и K, что позволяет наилучшим способом выделять дискретные координаты j из расчета их 10–15 значений. Нельзя забывать, что от обоснования нулевых значений пространственных координат могут зависеть простота и прогнозная вычислительная точность. Поэтому выбор координат желательно увязывать с особенностями поставленной прогнозной миграционной задачи.

Важным считаем обоснование *контрольных расчетных точек*, в которых надо организовать слежение за количеством итерационных циклов с учетом заданных погрешностей ξ_p, ξ_i. Судя по работе [8], таких итерационных циклов ожидается от нескольких сотен до нескольких тысяч.

Согласно рекомендуемой методике математического моделирования, **минимально необходимыми исходными данными** являются: размер изучаемого объекта, начальные $(p_{вс})^{\tau}_{z,i}$, $(p_{изб})^{\tau}_{z,i}$ и граничные условия, прогнозное время (Δt) и шаги расчетной сетки (Δx, Δz), нелинейные зависимости

$$W_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right),\ K_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right),\ D_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right),\ K_p(W_p),\ \xi_p,\ \xi_i,$$

а также отдельные свойства ρ_p, ρ_i, $\sigma_{1.3}$, $\sigma_{1.2}$, $\sigma_{1.4}$, ν_p, ν_i, η_p, динамическая вязкость ($\eta_p = \rho_p \cdot \nu$). Некоторые указанные характеристики могут зависеть от температуры, давления, концентрации и других факторов. Предварительно необходимо оценить возможные за их счет изменения, воспользовавшись стандартными таблицами и формулами [2, 3, 5, 9, 10]. В виде наглядного примера представим некоторые величины

$$\sigma_{1.3\,(20^{\circ}C,\ вода)} = 72{,}75 \cdot 10^{-3}\ Н/м,\quad \sigma_{1.4\,(0^{\circ}C,\ бензин)} = 63{,}9 \cdot 10^{-3}\ Н/м,$$

$$\sigma_{1.4\,(0^{\circ}C,\ раствор)} = 51{,}25 \cdot 10^{-3}\ Н/м,\quad \sigma_{1.2\,(0^{\circ}C,\ керосин)} = 27{,}4 \cdot 10^{-3}\ Н/м,$$

$$\sigma_{1.2\,(17{,}5^{\circ}C,\ бензол-C_6H_6)} = 29{,}16 \cdot 10^{-3}\ Н/м,\quad \rho_{p\,(20^{\circ}C,\ вода)} = 998{,}2\ кг/м^3,$$

$$\rho_{керосин} = 730\ кг/м^3,\quad \rho_{бензин} = 700 - 750\ кг/м^3,$$

$$\rho_{нефть} = 700 - 1040\ кг/м^3,\quad \nu_{20^{\circ}C,\ нефть} = (1{,}2 - 55) \cdot 10^{-6}\ м^2/с,$$

$$\nu_{20^{\circ}C,\ бензин} = (0{,}43 - 0{,}82) \cdot 10^{-6}\ м^2/с,$$

$$\nu_{20^{\circ}C,\ керосин} = (1{,}25 - 3{,}5) \cdot 10^{-6}\ м^2/с,\quad \eta_p = 1{,}002 \cdot 10^{-3}\ Па/с,$$

растворимость в воде нефти составляет $(10 - 50) \cdot 10^{-3}$ кг/дм^3, бензина – $(9 - 505) \cdot 10^{-3}$ кг/дм^3, керосина – $(2 - 12{,}5) \cdot 10^{-3}$ кг/дм^3.

Однотипная последовательность итерационных вычислительных операций предусматривается для чистой воды и разных растворов углеводородов. Ныне ограничимся лишь рекомендациями для чистой воды:

1. Желательно построить дополнительно нелинейные параметры: $W_i\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)$, $W_p\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_p}\right)$, $K_p(W_p)$, $K_i(W_i)$, $D_i\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)$, представив их, в частности, в виде таблиц.

2. Первичная обработка исходных данных с целью оценки нулевых итерационных значений для 1-й итерации включает следующее:

2.1. Определяем $\gamma_p = \rho_p \cdot g$, $\gamma_i = \rho_i \cdot g$, затем $(\bar{p}_{вс})^0_{z,i} = (p^{\tau}_{вс})_{z,i} + (p^{\tau}_{изб})_{z,i}$, далее

$$(\bar{\Phi}^{\tau}_p)^0_{z,i} = \left(\frac{\bar{p}_{вс}}{\gamma_p}\right)^0_{z,i} + z_{z,i},\quad (\Phi^{\tau}_i)^0_{z,i} = \left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i}\right)^0_{z,i} + z_{z,i}.$$

При отсутствии жидкого нефтепродукта "i", т. е. $W_i = 0$, а $\bar{p}_{вс} = p_{вс}$.

2.2. Находим $(W_p)^0_{z,i}\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)$,

$$K^0_p\left[\frac{\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)_{z+1,i} + \left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)_{z,i}}{2}\right],\quad D^0_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)_{z,i}$$

по дополнительному условию 1.1.

Напомним, что при $\bar{p}_{вс} \geq 0$, т. е. $W_i = 0$, следовательно $\bar{p}_{вс} = p_{вс}$, так как жидкий нефтепродукт отсутствует.

2.3. Оцениваем по дополнительному условию 1.1, в частности когда используем опытные

$$W_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right),\quad K_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right),$$

$$(W_i)^0_{z,i} = W_p\left(\beta_2 \cdot \frac{p_{изб}}{\gamma_p}\right)^0_{z,i} - W_p\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p}\right)^0_{z,i},$$

$$(D_p^0)_{z,i} = \gamma_p \left[\frac{(W_p)_j - (W_p)_{j+1}}{(p_{вс})_j - (p_{вс})_{j+1}} \right]^0,$$

$$(D_p^0)_{z,i} = D_i \left\{ \frac{\gamma_p}{\beta_2} \left[\frac{(W_i)_j - (W_i)_{j+1}}{(p_{изб})_j - (p_{изб})_{j+1}} \right]^0 \right\},$$

в частности

$$K^0_{z+1/2,\,i} = \frac{\nu_p}{\nu_i} \left[\frac{K_p (W_p)_{z+1,\,i} + K_{z,\,i} (W_p)}{2} \right]^0_{z+1/2,\,i}.$$

А также по остальным дополнительным условиям: $(W_i^0)_{z,i} = W_{пол} - W_p \left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p} \right)^0_{z,i}$

либо $W_i = 0$, $(K_i)_{z,i} = 0$.

3. Произведя решение за 1-ю итерацию при заданных начальных и граничных условиях I и II рода, получим согласно предложенным итерационным формулам, в частности для чистой воды: $(\overline{\Phi}_p^{\tau+1})^1_{z,i}$ и $(\overline{\Phi}_i^{\tau+1})^1_{z,i}$. Определим $(\overline{p}_{вс}^{\tau+1})^1_{z,i} = (\overline{\Phi}_p^{\tau+1})^1_{z,i} \cdot \gamma_p - z_{z,i} \cdot \gamma_p$ и $(p_{изб})^1_{z,i} = (\Phi_i^{\tau+1})^1_{z,i} \cdot \gamma_i - z_{z,i} \cdot \gamma_i$.

Теперь аналогично предыдущему п. 2 выполним операции, сходные с определением нулевой итерации, в результате которых получим параметры для 2-й итерации:

$$(p_{вс})^1_{z,i} = (\overline{p}_{вс}^{\tau+1})^1_{z,i} - (p_{изб}^{\tau+1})^1_{z,i},$$

согласно 1.1 $(W_p)^1_{z,i} = W_p \left[\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p} \right)_{z,i} \right]^1,$

$$K_p^1 \left[\frac{\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p} \right)_{z+1,i} + \left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p} \right)_{z,i}}{2} \right]^1,$$

$$D_p^1 \left[\gamma_p \frac{(W_p)_j - (W_p)_{j+1}}{(p_{вс})_j - (p_{вс})_{j+1}} \right]^1,$$

$$W_i^1 \left(\frac{p_{изб}}{\gamma_p} \right)^1_{z,i} = W_p \left[\beta_2 \cdot \left(\frac{p_{изб}}{\gamma_p} \right)^1_{z,i} \right] - W_p \left[\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p} \right)^1_{z,i} \right],$$

$$D_i^1 = D_i \left\{ \frac{\gamma_p}{\beta_2} \cdot \left[\frac{(W_i)_j - (W_i)_{j+1}}{(p_{изб})_j - (p_{изб})_{j+1}} \right]^1 \right\},$$

$$K^1_{z+1/2,\,i} = \frac{\nu_p}{\nu_i} \left[\frac{K_p (W_i)^1_{z+1,\,i} + K_p (W_i)^1_{z,\,i}}{2} \right],$$

а также по остальным дополнительным условиям $(W_i)^1_{z,i} = W_{пол} - W_p \left[\left(\frac{p_{вс}}{\gamma_p} \right)^1_{z,i} \right]_{z,i}$ или $W_i = 0$.

Обратим внимание, что пока предусматривалась чистая вода. Если же требуется учесть влияние растворенных углеводородов, то надо воспользоваться формулами с индексацией $(p_{вс})_{1.4}$, $(p_{вс})_{2.4}$, а также β_1 и β_4, даже возможно при определении исходных данных для нулевой итерации.

4. Продолжаем итерационные операции, сохраняя $\overline{\Phi}_p^\tau$, Φ_p^τ и граничные условия, пока на N-ю итерацию не достигнем в контрольных точках требуемой точности ξ_p, ξ_i.

5. Заканчиваются итерационные операции выдачей в удобном виде, например табличном, конечных значений $(\overline{\Phi}_p)^{\tau+1}_{z,i}$, $(\Phi_i)^{\tau+1}_{z,i}$, $\left(\frac{\overline{p}_{вс}}{\gamma_p} \right)^{\tau+1}_{z,i}$, $\left(\frac{p_{изб}}{\gamma_i} \right)^{\tau+1}_{z,i}$, $(W_p)^{\tau+1}_{z,i}$, $(W_i)^{\tau+1}_{z,i}$, а также прогнозных расходных значений в характерных сечениях изучаемого объекта.

6. При необходимости решения продолжаются на $\Delta t = t^{\tau+2} - t^\tau$, сохраняя в виде начальных условий первоначальные значения, либо при $\Delta t = t^{\tau+2} - t^{\tau+1}$, задаваясь для этого значениями соответствующих характеристик на $t^{\tau+1}$.

Кроме рассмотренных допущений, не были учтены другие механизмы и факторы миграции (например, электро-, термо- и концентрационный осмос и т. п.). Поэтому в связи со слабой изученностью исследуемого массопереноса целесообразно проводить прогнозные решения при крайне возможных значениях исходных параметров с целью обоснования оптимистических и пессимистических результатов прогнозов.

Предполагаемые специальные прогнозные тестовые решения должны включать следующее: *серию методических задач* по применимости расчетных схем и оценке достоверности временных (Δt) и пространственных шагов (Δz, Δx), дискретности нелинейных обобщенных зависимостей объемных содержаний и коэффициентов переноса жидкостей, оценке роли отдельных миграционных механизмов, например растворимости углеводородов в грунтовой жидкой влаге и др.; *серию задач для сравнения* с опытными экспериментами, особенно описанными в работе [5]; *серию задач практического внедрения.*

Отметим, что в некоторых случаях, например при покое или установившемся вертикальном переносе жидкостей, мы можем количественно и качественно предугадать истинное распределение специальных функций $(\overline{\Phi}_p)_z$ и $(\Phi_i)_z$ а значит, давлений жидкостей и их относительных объемных содержаний в грунтах. Это позволяет надеяться на успешное разрешение поставленных задач.

В общем случае количество итерационных циклов, равное количеству периодически повторяемых математических действий в каждой расчетной точке для каждого вещества (воды, нефтепродукта), увеличивается в несколько раз. В силу ожидаемых многочисленных вычислений, с которыми несомненно связано накопление и появление новых неконтролируемых ошибок (в частности, округлений и деления на числа, близкие нулю), может нарушаться устойчивость решений с точки зрения их сходимости к истинному конечноразностному решению. Поэтому стремление к универсальной вычислительной программе не оправдано. Целесообразнее ограничиться разработкой нескольких упрощенных программ для цифровых машин, удобных в эффективном использовании.

Именно таким программам и анализу выполненных прогнозных решений будет посвящена следующая статья.

1. *Бугай Д. А., Джепо С. П., Скальский А.С. и др.* Определение фильтрационных параметров водонасыщенных песчаных грунтов с помощью лабораторных и полевых методов // Геол. журн. – 2008. – № 4. – С. 99–106.
2. *Бэр Я., Заславски Д., Ирмей С.* Физико-математические основы фильтрации воды. – М.: Мир, 1971. – 452 с.
3. *Гороновский И. Т., Назаренко Ю. П., Некряч Е. Ф.* Краткий справочник по химии. – Киев: Наук. думка, 1987. – 829 с.
4. *Краткая* химическая энциклопедия / Гл. ред. Кнунянц И. Л.– М.: Сов. энцикл., 1965. – Т. 4 (П–С). – С. 922–925.
5. *Огняник Н. С., Парамонова Н. К., Брикс А. Л., Кононов Д. В., Пашковский И. С.* Основы изучения загрязнения геологической среды легкими нефтепродуктами – Киев: А.П.Н., 2006. – 279 с.
6. *Ситников А. Б.* О состоянии двух несмешивающихся жидкостей в грунтах // Геол. журн. – 2003. – № 3. – С. 147–149.
7. *Ситников А. Б.* Рекомендуемая методика математического моделирования нелинейного влагопереноса в ненасыщенно-насыщенных грунтах // Геол. журн. – 2009. – № 2. – С. 77–85.
8. *Ситников А. Б., Водолазкий В. И.* Особенности решения типовых прогнозных задач двухмерного нелинейного влагопереноса в грунтах // Там же – № 4. – С. 92–98.
9. *Ситников А. Б., Головченко Ю. Г., Ткаченко К. Д.* Гидрогеологическая станция "Феофания": многолетние исследования и результаты. – Киев: Наук. думка, 2003. – 200 с.
10. *Таблица* физических величин. Справочник / Под ред. акад. И.К. Кикоина. – М.: Атомиздат, 1976. – 1008 с.
11. *Хейфец Л. И., Неймарк А. В.* Многофазные процессы в пористых средах. – М.: Химия, 1982. – 320 с.

Ин-т геол. наук НАН Украины, Киев

Статья поступила 17.12.10

E-mail: geoj@bigmir.net