ISSN 2071-1859 (Print), ISSN 2521-6635 (Online)
УДК 622.411.33:004.942 https://doi.org/10.33271/crpnmu/86.069

© Р.С. Лисенко
[1] Національний технічний університет «Дніпровська політехніка», Дніпро, Україна

ІНФОРМАЦІЙНО-ОБЧИСЛЮВАЛЬНА СИСТЕМА ДЛЯ МОДЕЛЮВАННЯ ДИСОЦІАЦІЇ ГАЗОГІДРАТІВ У ВУГІЛЬНИХ ПЛАСТАХ

R. Lysenko[1] https://orcid.org/0000-0003-4651-5571
[1] Dnipro University of Technology, Dnipro, Ukraine

INFORMATION AND COMPUTING SYSTEM FOR MODELING GAS HYDRATE DISSOCIATION IN COAL SEAMS

Мета. Розроблення та обґрунтування інформаційно-обчислювальної системи для дослідження впливу пористості й температурних умов на положення та швидкість переміщення фронту дисоціації газогідратів у вугільних пластах.

Методика. Використано аналітичний розв'язок одновимірної задачі Стефана для пористого середовища з рухомою межею фазового переходу. Розрахунки організовано за сценарним підходом із варіюванням параметрів пласта. Для зіставлення результатів з даними вимірювань передбачено аналіз локальних відхилень і статистичних показників відповідності моделі.

Результати. Розроблено модульну інформаційно-обчислювальну систему з окремим обчислювальним ядром, засобами збереження та візуалізації результатів. Визначено правила контролю числової коректності результатів і завершення сценарію. Сформовано структуру даних, яка пов'язує незмінну версію параметрів вугільного пласта, окремий запуск і його підсумкові характеристики та часові ряди.

Наукова новизна. Розроблено метод комп'ютерного моделювання дисоціації газогідратів у вугільному пласті, який поєднує перевірку термобаричної допустимості сценарію з розрахунком просторово-часового розвитку зони фазового переходу. Встановлено компенсаційну залежність положення та швидкості фронту від сукупної дії пористості й температури, що дозволяє визначати поєднання цих параметрів, за яких зона дисоціації розвивається еквівалентно. Розроблено методику оцінювання застосовності моделі шляхом зіставлення положення фронту та температури в узгоджених часових і просторових координатах, а середніх швидкостей – за однаковими інтервалами спостереження, з урахуванням невизначеності вимірювань.

Практична значимість. Систему можна застосовувати для попереднього оцінювання просторових меж зони дисоціації газогідратів та її розвитку в часі поблизу дегазаційної свердловини. Порівняння сценаріїв дає змогу визначати умови для подальших досліджень фазового стану метану у вугільному пласті та готувати вхідні параметри для уточнених моделей газовиділення. Розрахункові характеристики дають змогу враховувати теплову складову дисоціації газогідратів під час дослідження умов дегазації вугільних пластів.

Ключові слова: *вугільний пласт, метан, газогідрати, фронт дисоціації, дегазація, задача Стефана, комп'ютерне моделювання.*

Вступ. Метан вугільних родовищ визначає газову небезпеку підземних гірничих робіт, а його каптування дегазаційними системами є одним із засобів зниження газового навантаження на виробки [1]. Дослідження джерел і динаміки газовиділення потребує врахування форм перебування метану у вуглепородному масиві. Основна його частина утримується вугільною речовиною у сорбованому стані, тоді як вільний метан заповнює порово-тріщинний простір, а певна кількість газу розчинена у пластовій воді [2].

За відповідного поєднання температури, тиску та доступності води метан здатний утворювати тверду газогідратну фазу, у якій його молекули включені до кристалічного каркаса води. Можливість цього процесу у вугільному середовищі підтверджена лабораторно: методами рентгенівської дифракції та ядерного магнітного резонансу встановлено формування метанового гідрату структури sI за участю природної вологи вугілля [3]. Дослідження вугільних зразків різного ступеня метаморфізму також показують вплив початкових тиску й водонасиченості на споживання метану та досягнуту гідратонасиченість [4]. Отже, газогідратний стан метану має експериментальне обґрунтування, хоча його наявність і поширення у конкретному природному пласті потребують окремого встановлення.

Розкриття пласта та створення дегазаційної депресії можуть знижувати тиск у поровому просторі. Якщо початковий стан відповідає умовам існування газогідратної фази, зниження тиску нижче рівноважного значення або підвищення температури здатне спричинити її дисоціацію з утворенням води та вивільненням метану. Поглинання теплоти під час цього переходу пов’язує його розвиток із тепловим станом середовища [5]. Таке додаткове надходження метану може підвищувати навантаження на дегазаційну та вентиляційну системи, що слід враховувати під час прогнозування газовиділення й обґрунтування безпечного відпрацювання пласта [1, 5]. Оцінювання газовиділення внаслідок дисоціації газогідратів потребує визначення просторових меж зони фазового переходу та характеру її поширення в часі.

У попередніх дослідженнях розроблено математичні підходи до опису тепломасообміну під час дисоціації газогідратів у пористому середовищі та оцінювання швидкості переміщення фронту фазового переходу [6, 7]. Однак організація серії розрахунків, контроль вхідних параметрів і зіставлення результатів виходять за межі математичної постановки. Практичне використання математичного опису дисоціації газогідратів потребує програмних засобів, які дозволяють працювати з різними гірничо-геологічними й термобаричними умовами та зберігати зв’язок результатів з вхідними параметрами. Розроблення такої інформаційно-обчислювальної системи створює основу для послідовного аналізу розвитку зони фазового переходу та зіставлення модельних характеристик з даними вимірювань.

Аналіз попередніх досліджень. Математичні підходи до дослідження дисоціації газогідратів у пористих геологічних середовищах відрізняються способом опису фазового переходу та складом процесів, які враховуються. Рівноважні моделі визначають фазовий стан за температурою, тиском і складом системи, тоді як кінетичні додатково враховують скінченну швидкість дисоціації. Комплексні постановки поєднують ці залежності з рівняннями теплообміну, багатофазної фільтрації та деформування середовища [8]. Для застосування у гірництві рівень деталізації моделі має відповідати поставленому завданню та наявним даним про пласт.

Математичною основою інформаційно-обчислювальної системи для дослідження дисоціації газогідратів у вугільних пластах є підходи, представлені у працях [6, 7]. У праці [6] розглянуто дисоціацію газогідратів у пористому шарі внаслідок зниження тиску на його межі та визначено зміни температури, тиску й положення фронту фазового переходу. У праці [7] запропоновано наближений підхід на основі розв'язання задачі Стефана, який дозволяє оцінювати вплив пористості та надлишкової температури на швидкість переміщення фронту дисоціації. Для дослідження вугільного пласта такий підхід дає змогу окремо аналізувати теплову складову розвитку зони фазового переходу, зберігаючи явний зв'язок між фізичними параметрами та розрахунковими характеристиками.

Для чисельного дослідження гідратовмісних геологічних середовищ створено спеціалізовані симулятори TOUGH+HYDRATE [9] та STOMP-HYD [10]. Вони реалізують спільне розв'язання рівнянь збереження маси й енергії та дозволяють моделювати фазові перетворення і перенесення флюїдів за неізотермічних умов. TOUGH+HYDRATE підтримує рівноважний і кінетичний описи утворення та дисоціації гідратів, а STOMP-HYD також враховує системи з метаном і діоксидом вуглецю. Такі засоби придатні для комплексного аналізу пластових процесів, однак їх застосування потребує узгодженого задання геометрії, властивостей середовища, початкових і граничних умов [9, 10].

Перенесення відповідних постановок на вугільний пласт потребує врахування його специфіки. Рух метану у вугіллі пов'язаний із сорбційними процесами, взаємодією матриці та тріщинної системи, а проникність залежить від пластового тиску й напруженого стану [2]. Тому для задач дегазації важливо встановлювати, які з цих зв'язків відтворює обрана модель і які дані необхідні для її застосування. Розрахунок переміщення фронту дисоціації характеризує розвиток зони фазового переходу; для прогнозування дебіту дегазаційної свердловини додатково потрібен опис фільтрації газу [2, 7].

Окремий напрям досліджень стосується перевірки та відтворюваності обчислень. У міжнародному порівняльному дослідженні [11] розв'язки різних симуляторів зіставлено на п'яти узгоджених еталонних задачах, що дозволило виявляти розбіжності й уточнювати програмні реалізації. У праці [12] обґрунтовано необхідність зберігати вихідні дані, параметри та версії програмних засобів, за допомогою яких отримано кожний результат. Для порівняння гірничих сценаріїв це означає потребу в однозначній фіксації умов пласта й обчислювальної процедури, щоб зміни результатів можна було пов'язати з конкретними змінами параметрів.

Формулювання невирішеної частини проблеми та мети. Невирішена частина проблеми полягає у створенні інструменту, який поєднує програмну реалізацію обраних математичних підходів до опису дисоціації газогідратів [6, 7] із формалізованим поданням умов вугільного пласта та процедурою оцінювання результатів. Для цього необхідно встановити відповідність між фізичними параметрами, розрахунковими операціями й вихідними характеристиками, забезпечити контроль термобаричної допустимості сценаріїв та визначити порядок зіставлення результатів моделювання з даними вимірювань.

Мета статті – розроблення та обґрунтування інформаційно-обчислювальної системи для моделювання дисоціації газогідратів у вугільних пластах, що забезпечує дослідження впливу пористості й температурних умов на положення та швидкість переміщення фронту фазового переходу в часі. Досягнення мети передбачає формалізацію обчислювального ядра, організацію збереження й порівняння розрахункових сценаріїв та створення методики зіставлення результатів з даними вимірювань.

Основна частина (Результати). Розроблена інформаційно-обчислювальна система призначена для дослідження розвитку зони дисоціації газогідратів у вугільному пласті за заданих термобаричних і теплофізичних умов. Розрахунковим об’єктом є пористий шар, у якому передбачається наявність газогідратної фази, а її розкладання описується тепловою моделлю з рухомою межею фазового переходу [7]. Система дозволяє оцінювати поширення зони дисоціації в часі, зокрема поблизу дегазаційної свердловини, та порівнювати її розвиток за різних властивостей пласта й умов теплового впливу.

Основною одиницею організації дослідження є розрахунковий сценарій. Під ним розуміється сукупність характеристик вугільного пласта, початкових і граничних умов та налаштувань моделювання, що задають конкретний варіант розрахунку. Сценарій містить відомості про порове середовище, температурний і баричний стан, тривалість процесу та часовий крок формування результатів.

Сценарний підхід використано для розмежування властивостей пласта та умов впливу на нього. Наприклад, зіставлення сценаріїв із різною пористістю за однакових температурних умов дає змогу оцінювати вплив будови порового середовища, а зміна температури на межі за незмінних властивостей пласта – вплив теплового чинника на розвиток зони дисоціації. Баричні параметри використовуються для перевірки умов фазового переходу; розрахунок переміщення фронту виконується в межах прийнятої теплової постановки. Зв’язок задач дослідження вугільного пласта з параметрами сценарію та результатами використання системи наведено в табл. 1.

Виконання сценарію забезпечується обчислювальним ядром, яке відтворює прийняті математичні залежності й формує результати для подальшого збереження та аналізу. Загальну схему реалізації моделі наведено на рис. 1.

Розрахунки ґрунтуються на аналітичному розв’язку задачі Стефана для пористого середовища [7]. Вугільний пласт розглядається в одновимірному наближенні, а фронт дисоціації – як плоска межа між зоною дисоційованого газогідрату та зоною його стабільного існування. Теплофізичні характеристики кожної зони приймаються сталими в межах досліджуваного температурного інтервалу. На фронті передбачається локальна термодинамічна рівновага; кінетичні особливості розкладання газогідрату не враховуються як окремий чинник обмеження швидкості процесу. За цих припущень просування фронту визначається інтенсивністю підведення теплоти до межі фазового переходу та кількістю енергії, необхідної для дисоціації газогідрату.

Таблиця 1

Зв’язок задач дослідження вугільного пласта
з можливостями інформаційно-обчислювальної системи

Задача дослідження	Параметри та дані сценарію	Результат використання системи
Оцінювання умов дисоціації газогідратів	Температура, пластовий тиск, тиск на межі, параметри фазової рівноваги	Перевірка термобаричної допустимості розвитку фазового переходу
Аналіз впливу властивостей пласта	Пористість і теплофізичні характеристики за узгоджених початкових та граничних умов	Зіставлення розвитку зони дисоціації для різних характеристик пористого середовища
Дослідження розвитку зони дисоціації в часі	Температурні умови, тривалість моделювання, часовий крок	Часові залежності положення й швидкості переміщення фронту, температурні характеристики середовища
Оцінювання застосовності моделі до заданих умов	Дані вимірювань щодо величин, відтворюваних моделлю	Зіставлення розрахункових і виміряних значень та оцінювання їхніх відхилень

Координата x, м, задає відстань від межі теплового впливу в напрямку поширення процесу; τ – час від його початку, с; $\xi(\tau)$ – положення фронту дисоціації, м. Температуру на межі теплового впливу позначено T_w, початкову температуру вугільного пласта – T_r, температуру фазового переходу за заданого тиску – T_f. Для ділянки поблизу свердловини величина T_w відповідає температурі на її стінці. Поширення зони дисоціації поблизу свердловини розглядається у локальному плоскому наближенні. Надлишкова температура, яка характеризує тепловий вплив, визначається як

$$\Delta T = T_w - T_f. \tag{1}$$

Пористість m характеризує частку порового простору в загальному об’ємі середовища, а гідратонасиченість S_h – частку цього простору, зайняту газогідратом. Обидві величини є безрозмірними. Разом із теплофізичними характеристиками складових вони задають властивості гідратовмісного середовища, необхідні для розрахунку теплопереносу та фазового переходу.

У прийнятій аналітичній постановці положення фронту описується залежністю [7]

$$\xi(\tau)=K\sqrt{\tau}, \tag{2}$$

де K – коефіцієнт просування фронту дисоціації, м/с$^{1/2}$; визначається як додатний корінь трансцендентного рівняння, наведеного у праці [7], яке виражає тепловий баланс на межі фазового переходу. Для незмінних параметрів сценарію коефіцієнт K залишається сталим. Його значення залежить від властивостей пористого середовища та температурних умов в обох зонах. Коефіцієнт K не є

швидкістю фронту: за однакової тривалості процесу він визначає відмінності у глибині поширення зони дисоціації.

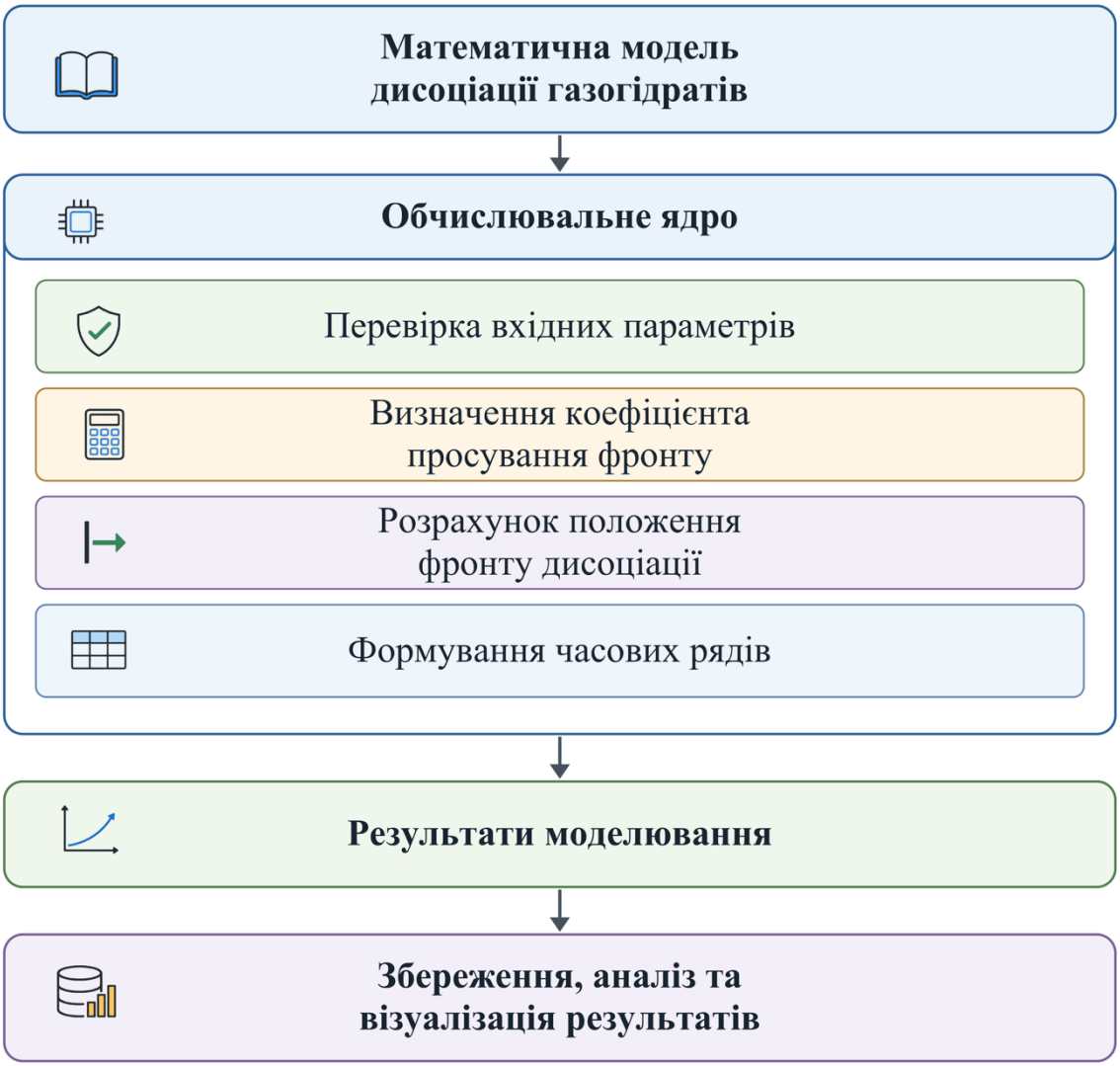


Рис. 1. Концептуальна схема реалізації математичної моделі
в інформаційно-обчислювальній системі

Швидкість переміщення фронту є похідною його положення за часом:

$$\frac{d\xi}{d\tau} = \frac{K}{2\sqrt{\tau}}, \qquad \tau > 0 \tag{3}$$

Отже, за незмінних умов теплового впливу просування фронту сповільнюється з часом. У початковий момент ця аналітична залежність не дає скінченного значення швидкості, що необхідно враховувати під час формування розрахункового часового ряду.

Температурний стан середовища описується функцією $T(x, \tau)$ окремо для зон дисоційованого та стабільного газогідрату. На їхній межі має виконуватися умова $T(\xi(\tau), \tau) = T_f$. Температурні результати доповнюють залежність поло-

ження фронту й дозволяють аналізувати розподіл теплоти в пласті. Баричні параметри задають умови фазової рівноваги та використовуються для перевірки допустимості теплового сценарію. Динамічне поле тиску й фільтрація газу в цій постановці не розраховуються.

Програмну реалізацію побудовано відповідно до фізичного змісту розрахункових величин. Функції обчислювального ядра розмежовано між компонентами підготовки параметрів, контролю умов фазового переходу, визначення коефіцієнта просування фронту та обчислення просторових і температурних характеристик (табл. 2).

Таблиця 2

Відповідність елементів математичної моделі функціям обчислювального ядра

Елемент математичної моделі	Функція компонента ядра
Пористість, гідратонасиченість і теплофізичні характеристики	Підготовка параметрів пористого середовища
Температури й тиски, що визначають умови фазового переходу	Перевірка термобаричної допустимості сценарію
Тепловий баланс на фронті дисоціації	Визначення коефіцієнта K
Залежність положення фронту від часу	Розрахунок $\xi(\tau)$ і похідних характеристик
Температурні залежності для двох зон	Визначення $T(x, \tau)$ і контроль температури на фронті

Такий поділ дозволяє перевіряти реалізацію кожної залежності окремо та встановлювати, з якою частиною моделі пов’язане відхилення результату. Основними розрахунковими характеристиками є положення фронту, швидкість його переміщення й температурний стан середовища. Вони характеризують розвиток зони дисоціації у вугільному пласті, проте самі по собі не визначають дебіт свердловини або кількість метану, що надходить до гірничих виробок.

Роботу обчислювального ядра організовано як послідовність перевірок і розрахункових операцій, що визначають можливість виконання заданого сценарію та порядок отримання результатів. На початковому етапі перевіряються повнота вхідних даних, одиниці вимірювання, допустимі значення пористості й гідратонасиченості, додатність теплофізичних характеристик і коректність часових параметрів. Виявлення відсутньої або некоректної обов’язкової величини припиняє виконання сценарію з повідомленням про причину.

Умовами застосування прийнятої теплової постановки є наявність газогідратної фази та її початкова термодинамічна стійкість, що за заданого пластового тиску відповідає співвідношенню $T_r \le T_f$. Розрахунок просування фронту дисоціації виконують за $T_w > T_f$, тобто за додатної надлишкової температури ΔT [7]. Якщо $T_w \le T_f$, тепловий вплив не забезпечує розвитку фронту в межах цієї постановки, тому формується відповідний результат без його просування. Такий

випадок відрізняють від помилки введення даних: параметри сценарію можуть бути коректними, але не відповідати умовам теплової дисоціації.

Для допустимого сценарію обчислюються надлишкова температура за формулою (1) та коефіцієнт K відповідно до прийнятого розв'язку задачі Стефана [7]. Початкове положення фронту узгоджується із залежністю (2): $\xi(0) = 0$. Після цього формується послідовність розрахункових моментів часу:

$$\tau_i = i\Delta\tau, \quad i = 0,1,\ldots,n, \tag{4}$$

де $\Delta\tau$ – часовий крок формування результатів, с; i – індекс часової точки; n – кількість кроків у заданому інтервалі моделювання. Тривалість цього інтервалу позначено τ_{max}, с.

Для кожного моменту τ_i за формулою (2) визначається положення фронту $\xi(\tau_i)$. Якщо сценарій передбачає аналіз температурного стану, додатково обчислюються значення $T(x, \tau_i)$ у заданих точках вугільного пласта. Швидкість фронту може визначатися за аналітичною залежністю (3) або за послідовними значеннями його положення:

$$v_i = \frac{\xi(\tau_i) - \xi(\tau_{i-1})}{\Delta\tau}, \; i = 1, \ldots, n. \tag{5}$$

Величина v_i, м/с, характеризує середню швидкість переміщення фронту за інтервал між двома сусідніми часовими точками. Для початкової точки значення швидкості не обчислюється.

Часовий крок обирається з урахуванням необхідної деталізації розвитку зони дисоціації, особливо на початковій стадії процесу. Для аналітичного розв'язку він визначає густоту розташування часових точок і тривалість інтервалу усереднення швидкості за формулою (5). Зменшення $\Delta\tau$ дозволяє детальніше відтворювати часові залежності, водночас збільшуючи обсяг сформованих даних. Значення положення фронту, обчислене за формулою (2) для того самого моменту часу, залишається незмінним.

Перед додаванням результатів поточного кроку до часового ряду перевіряються їхня числова та фізична допустимість. Контроль охоплює відсутність невизначених або нескінченних значень, відповідність положення фронту межам розрахункової області та його просування прийнятому напряму дисоціації. Розрахунок завершується після опрацювання заданого часового інтервалу або досягнення фронтом межі області. У разі виявлення некоректного результату виконання припиняється із зазначенням причини, щоб відокремити його від штатного завершення сценарію.

Загальну послідовність операцій і варіанти завершення розрахунку наведено на рис. 2.

Після завершення обчислень формується підсумковий результат із часовими рядами, максимальним просуванням фронту та повідомленнями про виконання сценарію. Разом із ним фіксуються момент і причина завершення. Це дозволяє під час зіставлення варіантів впливу на вугільний пласт враховувати, чи охоплюють результати весь заданий період, чи розрахунок завершився раніше.



Рис. 2. Блок-схема алгоритму роботи обчислювального ядра

Архітектура інформаційно-обчислювальної системи передбачає відокремлення обчислювального ядра від засобів введення параметрів, керування розрахунками та збереження результатів.

Клієнтську частину побудовано на Next.js і React, серверну – на NestJS; обчислювальне ядро оформлено як окремий пакет TypeScript, а для збереження даних використано PostgreSQL. Передавання параметрів і результатів між компонентами здійснюється через REST API. Серверні функції згруповано за сценаріями, розрахунками, результатами та порівняннями. У клієнтській частині предметні функції організовано за підходом Feature-Sliced Design: створення сценарію, запуск моделі та перегляд результатів мають окремі межі відповідальності. Такий поділ дозволяє змінювати спосіб подання даних, не змінюючи розрахункових залежностей ядра.

Ключовим для дослідження умов вугільного пласта є розмежування сценарію, його версії та окремого запуску. Сценарій об'єднує варіанти одного дослідження; версія містить конкретний незмінний набір характеристик пласта, термобаричних умов і часових налаштувань. Якщо хоча б один із цих параметрів змінюється, створюється нова версія. Окремий запуск посилається на неї та містить відомості про версію обчислювального ядра, стан виконання й причину завершення. Завдяки цьому повторний розрахунок можна зіставити з попереднім і встановити, які саме параметри пласта або версія програмної реалізації відрізнялися між запусками [12]. Для збереження розрахункових даних використано структуру, наведену в табл. 3.

Таблиця 3

Зв'язок даних сценарію, запуску та результатів моделювання

Об'єкт збереження	Відомості, пов'язані з об'єктом
Версія сценарію	Пористість, гідратонасиченість, теплофізичні характеристики, температури й тиски, тривалість і часовий крок моделювання
Запуск розрахунку	Посилання на версію сценарію, версія ядра, час і стан виконання, причина завершення
Підсумковий результат	Коефіцієнт просування фронту, його максимальне положення та інші узагальнені характеристики
Часові ряди	Час, положення і швидкість фронту; за наявності температурного розрахунку – значення температури для заданих координат
Дані вимірювань	Джерело та умови отримання, вимірювана величина, час і координата спостереження, значення та одиниця вимірювання
Порівняння	Зв'язок конкретного запуску з набором вимірювань і налаштування зіставлення

Підсумкові характеристики та часові ряди належать до одного запуску, але зберігаються окремо: першими користуються для огляду сценаріїв, другими – для аналізу розвитку зони дисоціації. Температурні точки також мають координату, оскільки одному моменту часу можуть відповідати значення температури в різних частинах розрахункової області. Фізичні величини зберігаються в узгоджених одиницях SI; значення, введені в інших одиницях, перетворюються до передавання в ядро. Це усуває неоднозначність при повторному використанні параметрів пласта.

Збереження підсумкового результату разом із часовими рядами передбачено як єдину транзакцію: запуск не позначається завершеним, якщо записано лише частину його даних. Для вимірювань передбачено окремі набори даних. Їхній зв'язок із конкретним запуском установлюється під час створення порівняння, що дає змогу використовувати один набір вимірювань для зіставлення з кількома варіантами моделі.

У клієнтській частині користувач задає характеристики вугільного пласта та умови впливу в окремих групах полів, а після розрахунку переглядає пов'язані з ними результати й обирає запуски для зіставлення. Поряд із часовими залежностями відображаються версія сценарію, одиниці вимірювання та стан виконання.

Для оцінювання застосовності моделі до заданих умов вугільного пласта збережені результати зіставляють із даними вимірювань. Перевірку правильності програмного відтворення рівнянь слід відрізняти від оцінювання відповідності моделі вимірюванням: правильне виконання алгоритму саме по собі не підтверджує адекватності прийнятих фізичних припущень. Відповідно до підходу ASME V&V 20 порівняння виконують для конкретної величини, у визначеній точці й за узгоджених умов досліду, враховуючи невизначеність як вимірювань, так і розрахунку [13].

Основною порівнюваною величиною є положення фронту дисоціації $\xi(\tau)$: воно безпосередньо характеризує поширення зони фазового переходу в пласті. Якщо межу дисоціації встановлюють опосередковано за температурними або іншими ознаками, спосіб її визначення має бути однаковим для всього ряду спостережень. За наявності температурних вимірювань другою основною величиною є $T(x, \tau)$, причому розрахункове та виміряне значення мають стосуватися тієї самої точки простору. Інші характеристики використовуються з урахуванням обмежень, наведених у табл. 4.

Швидкість, визначена за вимірюваннями, залежить від частоти спостережень і чутлива до похибок установлення положення фронту. Тому вона доповнює оцінювання часової залежності $\xi(\tau)$, але не замінює його. Збіг максимального просування також не означає збігу всього шляху фронту в часі. Коефіцієнт K використовують як узагальнену характеристику розрахункового сценарію; основною величиною для зіставлення з вимірюваннями є положення фронту $\xi(\tau)$.

Перед зіставленням перевіряють відповідність умов вимірювання параметрам конкретної версії сценарію: властивості досліджуваного вугілля, початкові температуру й тиск, спосіб впливу на пласт і тривалість процесу. Набір даних

вимірювань повинен містити джерело, вимірювану величину, одиницю вимірювання, часову й просторову координати та умови отримання значень. Для лабораторного досліду додатково фіксують характеристики зразка, положення датчиків і доступні оцінки невизначеності. Вимірювальні дані зберігають у початковому вигляді, а перетворення виконують над окремою підготовленою копією. Пропуски не замінюють нульовими значеннями; точку з великим відхиленням не вилучають лише через невідповідність моделі. Під час оцінювання розбіжностей враховують невизначеність вимірювань відповідно до настанови JCGM 100 [14].

Таблиця 4

Величини та умови зіставлення результатів моделювання з вимірюваннями

Розрахункова величина	Відповідні вимірювання	Необхідна умова зіставлення
Положення фронту $\xi(\tau)$	Межа зони дисоціації в окремі моменти часу	Єдиний початок відліку часу й однакова система координат
Температура $T(x, \tau)$	Покази датчика в контрольній точці	Збіг часу та координати датчика з точкою визначення модельної температури
Швидкість фронту	Приріст виміряного положення фронту за часовий інтервал	Порівняння середніх швидкостей за узгоджені інтервали; урахування шуму вимірювань
Максимальне просування фронту	Найбільша зареєстрована відстань до межі дисоціації	Однакова тривалість модельного й спостережуваного процесів

Після приведення величин до узгоджених одиниць час кожного спостереження відлічують від початку впливу на пласт. Порівнюють лише значення зі спільного часового інтервалу; за його межами модельний ряд не продовжують екстраполяцією. Якщо час спостереження τ_j припадає між двома точками збереженого модельного ряду, відповідне модельне значення визначають лінійною інтерполяцією:

$$M_j = M_i + \frac{M_{i+1} - M_i}{\tau_{i+1} - \tau_i}(\tau_j - \tau_i), \quad \tau_i \le \tau_j \le \tau_{i+1}, \tag{6}$$

де M_i і M_{i+1} – модельні значення в сусідні моменти τ_i та τ_{i+1}, а M_j – значення, приведене до часу спостереження. Виміряна точка при цьому залишається незмінною. Якщо порівнюють температуру, модельне значення додатково визначають у координаті відповідного датчика; за наявності лише дискретного температурного профілю використовують просторову інтерполяцію. Дані різних датчиків аналізують окремо, без попереднього усереднення.

Після узгодження отримують N пар M_j та O_j, де O_j – виміряне значення тієї самої фізичної величини в узгоджених часі й координаті, а N – кількість пар. Для кожної пари визначають локальне відхилення

$$e_j = M_j - O_j, \qquad j = 1, \ldots, N. \tag{7}$$

Додатний знак e_j відповідає завищенню модельного значення, від'ємний – заниженню. Послідовність цих відхилень розглядають разом із суміщеним графіком модельного ряду та вимірювань: вона показує, на якій стадії розвитку зони дисоціації з'являється розбіжність.

Для узагальнення величини відхилень використовують середнє абсолютне відхилення (MAE) та корінь із середнього квадрата відхилень (RMSE):

$$\mathrm{MAE} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N}\left|e_j\right| \qquad \mathrm{RMSE} = \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} e_j^2}\,. \tag{8}$$

Обидва показники мають одиницю порівнюваної величини; RMSE сильніше реагує на окремі великі розбіжності. Напрямок переважного відхилення визначають за середнім зміщенням

$$\mathrm{Bias} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} e_j\,. \tag{9}$$

Близьке до нуля значення Bias не означає відсутності локальних похибок, оскільки відхилення протилежних знаків можуть взаємно компенсуватися. Для зіставлення відносного масштабу похибок положення фронту й температури окремо для кожної величини визначають нормоване RMSE:

$$\mathrm{NRMSE} = \frac{\mathrm{RMSE}}{O_{max} - O_{min}}\,100\%. \qquad O_{max} > O_{min}. \tag{10}$$

За сталого виміряного ряду знаменник дорівнює нулю, тому цю метрику не обчислюють. Додатковою характеристикою відтворення мінливості ряду є коефіцієнт детермінації

$$R^2 = 1 - \frac{\sum_{j=1}^{N} e_j^2}{\sum_{j=1}^{N}\left(O_j - \overline{O}\right)^2}, \qquad \overline{O} = \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} O_j\,. \tag{11}$$

Його визначають лише за ненульової мінливості виміряних значень і тлумачать разом з абсолютними відхиленнями; на незалежній перевірній вибірці значення R^2 може бути від'ємним. Середню абсолютну відсоткову похибку до основного набору показників не включено: початкове положення фронту дорівнює нулю, а ділення на нульове або близьке до нуля виміряне значення робить такий показник непридатним для цієї ділянки ряду [15].

Оцінку відповідності моделі формують за сукупністю часових залежностей, локальних відхилень, наведених показників і невизначеності вимірювань. Якщо

параметри моделі уточнювали за певним набором вимірювань, висновок щодо її здатності відтворювати інші умови потребує незалежного набору. Для повної кількісної оцінки також необхідні відомості про невизначеність вхідних параметрів та вплив прийнятих спрощень моделі. Висновок, сформований за цією методикою, стосується лише досліджених властивостей вугілля й термобаричних умов.

Висновки. Розроблено інформаційно-обчислювальну систему для моделювання дисоціації газогідратів у вугільних пластах. Система забезпечує отримання часових залежностей положення та швидкості переміщення фронту фазового переходу, а також температурних характеристик середовища. Організація розрахунків у вигляді сценаріїв дозволяє порівнювати розвиток зони дисоціації за різних значень пористості й температурних умов.

Науково-методична новизна полягає у формалізації зв'язку між параметрами вугільного пласта, перевіркою термобаричної допустимості сценарію, операціями обчислювального ядра та результатами моделювання. Розмежування незмінної версії сценарію й окремого запуску забезпечує простежуваність отриманих характеристик і створює основу для відтворюваних обчислювальних досліджень.

Розроблено методику зіставлення модельних результатів з даними вимірювань. Вона передбачає узгодження умов дослідження, фізичних величин, часових і просторових координат та оцінювання локальних і узагальнених відхилень з урахуванням невизначеності вимірювань. Методика визначає порядок перевірки застосовності моделі до конкретних властивостей вугілля й термобаричних умов.

Практичне значення системи полягає в можливості попереднього оцінювання просторових меж зони дисоціації та її розвитку в часі, зокрема поблизу дегазаційної свердловини. Такі оцінки можуть використовуватися для планування досліджень фазового стану метану та процесів, пов'язаних із дегазацією вугільного пласта.

Подальший розвиток передбачає зіставлення розрахунків з незалежними вимірюваннями та доповнення ядра моделями масового балансу й фільтрації вивільненого метану.

Перелік посилань

1. Karacan, C. Ö., Ruiz, F. A., Cotè, M., & Phipps, S. (2011). Coal mine methane: A review of capture and utilization practices with benefits to mining safety and to greenhouse gas reduction. *International Journal of Coal Geology, 86*(2–3), 121–156. https://doi.org/10.1016/j.coal.2011.02.009
2. Gao, C., Liu, D., Li, Z., Cai, Y., & Fang, Y. (2021). Fluid performance in coal reservoirs: A comprehensive review. *Geofluids, 2021*, Article 6611075. https://doi.org/10.1155/2021/6611075
3. Bustin, A. M. M., Bustin, R. M., Moudrakovskim, I. L., Takeya, S., & Ripmeester, J. A. (2016). Formation of methane clathrate hydrates in coal moisture: Implications for coalbed methane resources and reservoir pressures. *Energy & Fuels, 30*(1), 88–97. https://doi.org/10.1021/acs.energyfuels.5b01922
4. Sun, C., Liu, S., Li, S., Wang, K., Dong, Z., & Kong, S. (2025). Methane hydrate formation characteristics under different initial conditions and their impact on coal seam properties. *Advances in Geo-Energy Research, 16*(3), 229–243. https://doi.org/10.46690/ager.2025.06.04

5. Ruppel, C. D., & Waite, W. F. (2020). Grand challenge: Timescales and processes of methane hydrate formation and breakdown, with application to geologic systems. *Journal of Geophysical Research: Solid Earth, 125*(8), Article e2018JB016459. https://doi.org/10.1029/2018JB016459
6. Dreus, A. Yu., Bondarenko, V. I., Biletskyi, V. S., & Lysenko, R. S. (2020). Mathematical simulation of heat and mass exchange processes during dissociation of gas hydrates in a porous medium. *Naukovyi Visnyk Natsionalnoho Hirnychoho Universytetu*, (5), 33–39. https://doi.org/10.33271/nvngu/2020-5/033
7. Dreus, A., Gubin, O., Bondarenko, V., Lysenko, R., & Liu, B. (2021). An approximate approach to estimation of dissociation rate of gas hydrate in porous rock bed. *E3S Web of Conferences, 230*, Article 01002. https://doi.org/10.1051/e3sconf/202123001002
8. Ning, Z.-J., Lu, H.-F., Zheng, S.-F., Xing, D.-H., Li, X., & Liu, L. (2023). Modeling and numerical investigations of gas production from natural gas hydrates. *Energies, 16*(20), Article 7184. https://doi.org/10.3390/en16207184
9. Moridis, G. J., Kowalsky, M. B., & Pruess, K. (2008). *TOUGH+HYDRATE v1.0 user's manual: A code for the simulation of system behavior in hydrate-bearing geologic media* (Report No. LBNL-149E). Lawrence Berkeley National Laboratory. https://doi.org/10.2172/927149
10. White, M. D., & McGrail, B. P. (2006). STOMP-HYD: A new numerical simulator for analysis of methane hydrate production from geologic formations. In A. Reedman, Y. S. Park, J. J. Bahk, & N. Chaimanee (Eds.), *Proceedings of the 2nd International Symposium on Gas Hydrate Technology at the 43rd CCOP Annual Session* (pp. 77–86). Coordinating Committee for Geoscience Programmes in East and Southeast Asia. https://www.pnnl.gov/publications/stomp-hyd-new-numerical-simulator-analysis-methane-hydrate-production-geologic
11. White, M. D., Kneafsey, T. J., Seol, Y., Waite, W. F., Uchida, S., Lin, J. S., Myshakin, E. M., Gai, X., Gupta, S., Reagan, M. T., Queiruga, A. F., Kimoto, S., & IGHCCS2 Participants. (2020). An international code comparison study on coupled thermal, hydrologic and geomechanical processes of natural gas hydrate-bearing sediments. *Marine and Petroleum Geology, 120*, Article 104566. https://doi.org/10.1016/j.marpetgeo.2020.104566
12. Sandve, G. K., Nekrutenko, A., Taylor, J., & Hovig, E. (2013). Ten simple rules for reproducible computational research. *PLOS Computational Biology, 9*(10), Article e1003285. https://doi.org/10.1371/journal.pcbi.1003285
13. American Society of Mechanical Engineers. (2009). *Standard for verification and validation in computational fluid dynamics and heat transfer* (ASME V&V 20-2009, reaffirmed 2021). https://www.asme.org/codes-standards/find-codes-standards/standard-for-verification-and-validation-in-computational-fluid-dynamics-and-heat-transfer
14. Joint Committee for Guides in Metrology. (2008). *Evaluation of measurement data–Guide to the expression of uncertainty in measurement* (JCGM 100:2008). Bureau International des Poids et Mesures. https://doi.org/10.59161/JCGM100-2008E
15. Hyndman, R. J., & Koehler, A. B. (2006). Another look at measures of forecast accuracy. *International Journal of Forecasting, 22*(4), 679–688. https://doi.org/10.1016/j.ijforecast.2006.03.001

ABSTRACT

Purpose. To develop and substantiate an information and computing system for studying the effects of porosity and temperature conditions on the position and propagation rate of the gas hydrate dissociation front in coal seams.

The methods. An analytical solution to the one-dimensional Stefan problem for a porous medium with a moving phase boundary is used. Calculations use a scenario-based approach with variation of

coal seam parameters. The procedure for comparing results with measurement data includes analysis of local deviations and statistical measures of model agreement.

Findings. A modular information and computing system has been developed with a separate computational core and tools for storing and visualizing results. Rules for checking the numerical validity of results and terminating a scenario have been defined. The data structure links an immutable version of coal seam parameters to an individual run, its summary characteristics and time series.

The originality. A method has been developed for computer modeling of gas hydrate dissociation in a coal seam, combining checks of scenario thermobaric admissibility with calculation of the spatial and temporal evolution of the phase transition zone. A compensatory relationship has been established for the effects of porosity and temperature on front position and propagation rate, allowing identification of parameter combinations that yield equivalent evolution of the dissociation zone. A procedure has been developed for assessing model applicability by comparing front positions and temperatures at aligned temporal and spatial coordinates, and average front propagation rates over identical observation intervals, accounting for measurement uncertainty.

Practical implementation. The system can be used for preliminary assessment of the spatial extent and time evolution of the gas hydrate dissociation zone near a degasification borehole. Comparing scenarios helps define conditions for further studies of the methane phase state in a coal seam and prepare inputs for refined gas emission models. The calculated characteristics help account for the thermal component of gas hydrate dissociation when studying coal seam degasification conditions.

Keywords: *coal seam, methane, gas hydrates, dissociation front, degasification, Stefan problem, computer modeling.*

дата першого надходження статті до видання	24.07.2026
дата прийняття до друку статті після рецензування	25.08.2026
дата публікації (оприлюднення)	30.09.2026

© 2026. R. Lysenko
Published by the Dnipro University of Technology on behalf of Collection of Research Papers of the National Mining University. ISSN 2521-6635 (Online) | ISSN 2071-1859 (Print). This is an Open Access article distributed under the terms of the Creative Commons Attribution License (http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/), which permits unrestricted reuse, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.