

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М.В. ЛОМОНОСОВА
ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ



На правах рукописи

Самарцев Всеволод Николаевич

**Обоснование геофильтрационных и геомиграционных моделей
участков загрязнения и эксплуатации подземных вод с
использованием метода совместной калибровки**

Специальность 1.6.6 – Гидрогеология

ДИССЕРТАЦИЯ

На соискание ученой степени
кандидата геолого-минералогических наук

Научный руководитель:
доктор геолого-минералогических наук,
с.н.с. Поздняков Сергей Павлович

Москва – 2022

Оглавление

Введение	4
Глава 1. Современные подходы и проблемы калибровки моделей гидрогеологических процессов	9
1.1. Понятие модели в гидрогеологии методы моделирования.....	9
1.1.1. Этапы разработки моделей гидрогеологических объектов	12
1.1.2. Понятие эффективных параметров	15
1.2 Калибровка, как метод решения обратных задач	20
1.2.1 Прямые методы решения обратных задач.....	21
1.2.2 Приближенные методы решения обратных задач.....	23
1.3 Типы данных, используемые при решении обратных задач.....	30
1.3.1 Напоры подземных вод	30
1.3.2 Расход поверхностных водотоков.....	32
1.3.3 Концентрации растворенных веществ.....	33
1.3.4 Температура подземных вод.....	35
1.3.5 Возраст подземных вод	36
1.3.6 Совмещение различных наборов параметров	38
1.4 Выводы по главе 1	39
Глава 2. Методика полуавтоматической калибровки моделей гидрогеологических объектов	41
2.1 Целевая функция	43
2.2 Оценка чувствительности модели к изменению параметров	46
2.3 Использование регуляризации при калибровке моделей	50
2.3.1 Ручная регуляризация.....	51
2.3.2 Математическая регуляризация.....	52
2.4 Практический алгоритм проведения калибровки	56
2.4.1 Подготовка наблюдений	56
2.4.2 Выбор параметров.....	57
2.4.3 Проведение этапа автоматической калибровки.....	57
2.5 Методика совместной калибровки	59
2.6 Оценка результатов калибровки.....	61
Глава 3. Тестирование методики совместной калибровки.....	68
3.1 Совместная калибровка геофильтрационной и геомиграционной моделей на примере миграции загрязнения из бассейна проток.....	68
3.1.1 Геологические и гидрогеологические условия	68

3.1.2	Постановка задачи	73
3.1.3	Геофильтрационная схематизация и описание модели.....	74
3.1.4	Калибрация модели.....	81
3.2	Калибрация профиля проводимости в одномерном геофильтрационном и геомиграционном потоке	88
3.2.1	Постановка второй тестовой задачи	88
3.2.2	Калибрация модели.....	89
3.3	Выводы по главе 3	98
Глава 4. Применение многомодельной совместной калибрации для переоценки запасов подземных вод на участке водозабора ВПС-4 (г. Воронеж).....		99
4.1	Описание объекта.....	99
4.2	Обоснование и калибрация геофильтрационной модели для переоценки запасов водозабора ВПС 4	107
4.2.1	Опытно-фильтрационные работы	110
4.2.2	Построение математической геофильтрационной модели	111
4.2.3	Раздельная обработка опытных кустовых откачек на моделях.....	115
4.2.4	Совместная калибрация по данным откачек и режимных наблюдений.....	121
4.3	Выводы по главе 4	138
Глава 5. Применение метода совместной калибрации при разработке геофильтрационных моделей подземного стока бассейнов малых рек.....		139
5.1	Бассейн р. Хворостань	140
5.1.1	Описание объекта	140
5.1.2	Описание модели	149
5.1.3	Выбор параметров для калибрации.....	152
5.1.4	Калибрация модели.....	158
5.1.5	Учет неоднородности донных отложений р. Хворостань.....	162
5.2	Бассейн р. Судогда	166
5.2.1	Описание объекта	166
5.2.2	Описание модели	171
5.2.3	Калибрация модели.....	174
5.3	Выводы по главе 5	184
Заключение		185
Список литературы		187
Приложение 1. Разрезы по скважинам на участке ВПС-4 г. Воронежа		199
Приложение 2. Практическая реализация совместной калибрации		201

Введение

Актуальность работы

В настоящее время численное моделирование природных процессов, описываемых уравнениями математической физики, широко используются для решения прикладных задач в самых разных областях наук о Земле. В гидрогеологии для количественного анализа гидрогеологических процессов в основном используются геофильтрационные (например, для оценки запасов подземных вод) и геомиграционные (например, для прогноза миграции химического и теплового загрязнения) модели.

Калибровка модели является важным этапом ее разработки [57]. Этот этап представляет собой решение так называемой обратной задачи – определение значений параметров, входящих в теоретические уравнения, по известным выходным данным – наблюдениям за моделируемым процессом, описываемым этими уравнениями. В геологии, в связи с неоднородностью строения литосферы, обычно модельные параметры известны только приблизительно, и требуется уточнение их значений в ходе разработки модели. Поэтому модели без калибровки, как правило, плохо воспроизводят природные условия и не могут быть использованы для решения прогнозных задач.

На начальном этапе развития методов численного моделирования калибровка моделей производилась вручную. Уже в конце 1970-х появились методы автоматической калибровки, в которых часть рутинных операций выполнял компьютер в автоматическом режиме. Однако до сих пор ежегодно публикуются сотни статей, посвященных калибровке моделей при решении задач, связанных с подземными водами. В них демонстрируются результаты применения известных методик, предлагаются новые методы и подходы, описывается разработка новых программных кодов, что подтверждает актуальность проблемы разработки практической методики калибровки моделей гидрогеологических процессов.

Цели и задачи работы

Цель работы - разработка методики совместной калибровки моделей гидрогеологических процессов с использованием существующих инструментов автоматизации решения обратных задач.

Для достижения поставленной цели в работе были решены следующие задачи:

1. Типизация условий применимости совместной калибровки и верификация процесса автоматической калибровки геофильтрационных моделей на синтетических примерах.
2. Обоснование методов совместной калибровки разномасштабных геофильтрационных моделей на участках переоценки запасов подземных вод.
3. Анализ эффективности метода совместной калибровки при обосновании моделей геофильтрационных процессов в бассейнах малых рек.

4. Анализ преимуществ и ограничений метода совместной калибровки моделей по сравнению с традиционными методами.

Объект и предмет исследования

Объектом исследований являются локальные потоки подземных вод в условиях техногенного воздействия на них за счет водоотбора или загрязнения.

Предмет исследований – неопределенность численных моделей гидрогеологических процессов в этих потоках, связанная с ограниченной исходной информацией о параметрах. Разрабатываемая методика направлена на снижение этой неопределенности.

Научная новизна

Научная новизна работы заключается в разработке методики полуавтоматической совместной калибровки численных моделей гидрогеологических процессов. Предлагаемая методика позволяет более эффективно использовать данные наблюдений и оптимизировать процесс обоснования прогнозных моделей.

Для случая совместной калибровки предложена новая зависимость для расчета весового коэффициента, необходимого для корректного учета и сравнения наблюдений различных типов.

Обоснован метод совместного использования данных разведочных работ (опытные откачки) и объектного мониторинга за режимом эксплуатации при переоценке запасов действующих водозаборов подземных вод.

На синтетическом примере и на модели участка водозабора ВПС-4 показана принципиальная возможность в полуавтоматическом режиме оценивать пространственную изменчивость параметров по имеющимся наблюдениям.

Теоретическая значимость

Теоретическая значимость работы состоит в выявлении и типизации условий эффективного применения совместной калибровки моделей гидрогеологических процессов и разработке метода корректного совместного использования наблюдений различных типов в процессе полуавтоматической калибровки с применением предложенных автором весовых коэффициентов.

Практическая значимость

Разработанная методика калибровки моделей была применена для решения следующих прикладных задач:

- Составление прогноза поступления загрязнения к водозабору ВПС-9 г. Воронежа;
- Переоценка эксплуатационных запасов подземных вод на участке водозабора ВПС-4 г. Воронежа;

- Оценка эксплуатационных запасов на участке «Водозаборный узел I» Южно-Воронежского месторождения пресных подземных вод;
- Разработка геофильтрационных моделей территории месторождения медно-никелевых руд Новохоперского района Воронежской области, участки «Еланское» и «Елкинский»;
- Обоснование геогидрологической модели Судогодского месторождения подземных вод.
- Обоснование геофильтрационной модели Хиагдинского рудного поля.

Разработанная методика используется в курсе “Калибровка геофильтрационных моделей”, разработанным и читаемом автором магистрантам геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова, и при выполнении выпускных работ магистрантами кафедры гидрогеологии.

Методология диссертационного исследования.

Исследование проводилось на основе модельно-ориентированного подхода к анализу гидрогеологических процессов. В рамках этого подхода разрабатывались как тестовые модели, так и модели реальных объектов для оценки и снижения неопределенности выполняемых с помощью моделирования прогнозов геофильтрации и геомиграции в условиях ограниченного объема исходных данных. Методика разрабатывалась на основе ряда примеров:

1. Синтетический одномерный геофильтрационный и геомиграционный поток.
2. Поток подземных вод в районе шламохранилища Сибирского химического комбината (СХК).
3. Водозабор ВПС-4 г. Воронежа, приречного типа, на котором выполнялась переоценка запасов подземных вод.
4. Южно-Воронежское месторождение пресных подземных вод, на котором выполнялась оценка запасов и необходимо было спрогнозировать влияние водозаборов на сток р. Хворостань.
5. Судогодское месторождение подземных вод, для которого оценивались составляющие баланса и оценка влияния изменения климата на сток р. Судогда.

Использование тестовых моделей с искусственно заданным набором параметров позволило оценить точность подбора параметров при калибровке. Калибровка тестовых моделей выполнялась по схеме слепого эксперимента. Эффективность калибровки моделей реальных объектов оценивалась по формальным показателям качества. Все рассматриваемые модели разрабатывались с помощью общедоступных программ Modflow [96] и MT3DMS [146]. Для решения обратных задач (калибровки моделей) использовались программы PEST [73] и UCODE [120].

Защищаемые положения

1. На основе анализа теоретических моделей гидрогеологических процессов и типов данных наблюдений проведена типизация условий, в которых следует применять совместную калибровку для обоснования численных моделей локальных потоков подземных вод и разработана общая методика ее использования.

2. При совместной калибровке необходимо уравнивать вклад различных типов наблюдений, имеющих разную физическую размерность и разное количество измерений, в минимизируемую функцию невязки модельных результатов и данных наблюдений. Для этого предложена новая зависимость для расчета весовых коэффициентов индивидуальных наблюдений.
3. На синтетических моделях и на моделях реальных объектов показано, что совместная калибровка позволяет получить более достоверные значения искомых параметров, чем последовательная.
4. Эффективно объединение в общий процесс калибровки как моделей различных процессов, так и различных моделей одного процесса и различных типов наблюдений в рамках одной модели.

Обоснованность и достоверность результатов исследования

Обоснованность и достоверность результатов исследования и выводов основывается на: 1) изучении и применении современного опыта работы с численными моделями гидрогеологических процессов по многочисленным публикациям; 2) применении современного программного обеспечения, пользующегося высокой репутацией в гидрогеологической среде, для разработки численных моделей и их калибровки; 3) использовании данных мониторинга и опробования для обоснования результатов, полученных на конкретных объектах; 4) апробации основных научных положений в виде докладов на профессиональных конференциях и публикацией в рецензируемых журналах.

Апробация результатов работы

Основные результаты работы, полученные в ходе работы над диссертацией, докладывались на:

- Всероссийской конференции молодых ученых, посвященной памяти В.А. Мироненко «Дерзость Надежд» (СПб, 2010);
- Научно-технической конференции «Гидрогеоэкология: вчера, сегодня, завтра» (Москва, ОАО «НИИ ВОДГЕО», 2011);
- Международной конференции «ModelCare» (Германия, Лейпциг, 2011);
- Международной научной конференции «Гидрогеология сегодня и завтра: наука, образование, практика» (Москва, 2013);
- Всероссийской научно-практической конференции «Математическое моделирование, геоинформационные системы и базы данных в гидрогеологии» (Московская область, 2013);
- Конференции «Современные проблемы гидрогеологии, инженерной геологии и гидрогеоэкологии Евразии», (Томск, 2015);

- Конференции «Перспективы развития инженерных изысканий в строительстве в Российской Федерации» (СПб, 2016);
- 44th Annual Congress of the International Association of Hydrogeologists (IAH) (Дубровник, 2017);
- На XXII (2017) и XXIII (2021) Совещаниях по подземным водам Сибири и Дальнего Востока;
- На XIV Общероссийской научно-практической конференции и выставке «Перспективы развития инженерных изысканий в строительстве в Российской Федерации» (Москва, 2018).

Личный вклад автора

Автор участвовал в постановке основных задач диссертации и самостоятельно занимался их решением. Автором проведена основная часть работ по разработке описанных в работе моделей реальных объектов и самостоятельно в полном объеме выполнена их калибровка.

Публикации

По теме диссертации опубликовано 10 печатных работ, в том числе 7 статей в рецензируемых научных изданиях, рекомендованных Положением МГУ о присуждении ученых степеней в Московском государственном университете имени М.В. Ломоносова, и получен один патент.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, 5 глав, заключения и списка литературы. Общий объем диссертации 216 страниц, в том числе 81 рисунок, 25 таблиц и два приложения на 18 страницах. Список литературных источников состоит из 161 наименования.

Финансовая поддержка.

Работа выполнена при частичной поддержке грантов РФФИ №№ 16-17-10187, 21-47-00008 и госбюджетной темы АААА-А16-116033010122-4.

Благодарности

Автор выражает благодарность научному руководителю – д.г.-м.н. Позднякову Сергею Павловичу за неоценимую помощь при выполнении исследования, моральную поддержку и безграничное терпение, проявленное при подготовке научной работы.

Огромная признательность выражается всем сотрудникам кафедры гидрогеологии геологического факультета МГУ имени М.В. Ломоносова за помощь в работе и дружескую поддержку, особенно к.г.-м.н. Лехову Владимиру Алексеевичу, д.г.-м.н. Гриневскому Сергею Олеговичу и Муромец Наталии Николаевне.

Глава 1. Современные подходы и проблемы калибрации моделей гидрогеологических процессов

1.1. Понятие модели в гидрогеологии методы моделирования

Познание окружающего мира в современной науке неразрывно связано с понятием модели. В науках о Земле наблюдаемые процессы и явления описываются некоторыми упрощенными математическими моделями, основанными на базовых законах сохранения массы, энергии, импульса и (полу)эмпирических законах переноса, таких как законы Дарси, Фика, Ома, Фурье и др. Гидрогеология не является исключением. Процессы геофильтрации, переноса растворенных веществ и тепла в подземных водах описываются дифференциальными уравнениями в частных производных, связывающих искомые неизвестные – напор подземных вод, концентрации растворенных в них веществ и температуру с геофильтрационными и геомиграционными параметрами среды [50]. Поэтому далее под моделью гидрогеологического процесса будем понимать их описание в виде соответствующих дифференциальных уравнений.

Конкретная реализация математических моделей гидрогеологических процессов происходит применительно к гидрогеологическим объектам – потокам подземных вод или участкам этих потоков, на которых исследуется гидрогеологический процесс (процессы) и для которых требуется выполнить прогноз развития исследуемого процесса. Применение математической модели процесса к изучаемому объекту, то есть задание пространственного распределения параметров модели и решение соответствующего дифференциального уравнения в заданной области при заданных граничных и начальных условиях будем далее называть моделью гидрогеологического объекта. По методам реализации т.е. процессу решения эти модели можно разделить на три типа – аналитические, аналоговые и численные.

Аналитические модели описывают процессы в сильно упрощенной постановке и основаны на аналитических решениях соответствующих краевых задач для уравнения геофильтрации. Например, известное уравнение Дюпюи, связывающее понижение в водозаборной скважине S_c с ее дебитом Q и проводимостью T водоносного горизонта:

$$S_c = \frac{Q}{2\pi T} \ln \frac{R}{r_c} \quad (1.1)$$

Это уравнение описывает идеализированную модель напорного водоносного горизонта со следующими допущениями: горизонт изолированный и однородный в пространстве, фильтрационный поток стационарный и существует так называемый радиус питания R , на котором понижение равно нулю. Ни одно из этих допущений в действительности не выполняется ни для одного водоносного горизонта. Использование подобных аналитических моделей

возможно только с некоторой погрешностью, которая и обусловлена отличием реального объекта от его идеализированного отображения (модели). Аналитические модели успешно используются в гидрогеологии на протяжении уже более 150 лет. Работа Анри Дарси, в которой описан основной закон фильтрации, носящий его имя, опубликована в 1856 году, а затем его последователями, начиная с работ Дюпюи [76], получено достаточно большое количество аналитических решений для различных схем. Тем не менее применять аналитические модели необходимо с осторожностью, учитывая все принимаемые допущения и упрощения, связанные прежде всего с пренебрежением или упрощением реальной геофильтрационной неоднородности, необходимые для получения аналитического решения.

Уже довольно давно в гидрогеологии возникла необходимость использовать модели более приближенные к реальным объектам, чем те идеализированные в процессе схематизации расчетные схемы, для которых возможно получение аналитических решений. В частности, аналитические модели не позволяют детально учесть неоднородность свойств водоносных горизонтов. Это привело к развитию различных аналоговых моделей, реализующих математически подобные физические поля. Сравнительно простые, такие как прибор Лукьянова, использовались с конца 1930-х гг. Аналоговые модели, основанные на подобию движения подземных вод и электрического тока в России получили распространение в 1960х-80х годах. Методы аналогового моделирования описаны, например, в монографии Л. Лукнера и В.М. Шестакова [27], но аналоговые методы в настоящее время практически не используются и поэтому в данной работе не рассматриваются.

Численное моделирование с помощью программ, написанных для ЭВМ, начало развиваться немногим позже. Первые работы, посвященные разработке соответствующих программ, появляются в конце 1960х - начале 1970х годов, например [128]. Уже в упомянутой работе Лукнера и Шестакова, изданной в 1976 году, численное моделирование рассматривается наравне с аналоговым. В дальнейшем численные модели вытеснили аналоговые. Несмотря на длительную историю, методики численного моделирования продолжают развиваться. В настоящее время проводятся узкоспециализированные международные конференции посвященные исключительно проблемам численного моделирования, такие как ModelCare. Развитие вычислительной техники позволяет решать более сложные задачи, использовать большие объемы данных и создавать более детальные модели изучаемых объектов. Развитие вычислительной техники позволяет решать более сложные задачи, использовать большие объемы данных и создавать более детальные модели изучаемых объектов.

В 1970х – 1980х в большинстве случаев программы для моделирования разрабатывались гидрогеологами самостоятельно. Часто программы разрабатывали отдельно для каждой задачи, с учетом моделируемых процессов. Уже в 1980-х годах стали появляться более универсальные

программы, рассчитанные на широкое применение. Самой известной и используемой из них в настоящее время является программа MODFLOW, разрабатываемая Геологической Службой США (USGS). Ее первая публичная версия была выпущена в 1984 году [115], и с тех пор постоянно дорабатывалась. Развитие MODFLOW продолжается и в настоящее время, для решения все более сложных задач. В настоящее время существует множество коммерческих и бесплатных программ для моделирования, имеющие различные возможности и специализированные для решения различных задач. При этом необходимо отметить, что самые известные и коммерчески успешные программные продукты для разработки математических моделей в гидрогеологии, не являются собственно программами для моделирования. Такие продукты как Visual Modflow, Processing Modflow, GMS, Groundwater Vistas, Leapfrog Hydro на самом деле являются всего лишь графическими оболочками. Вычислительными модулями в большинстве случаев являются MODFLOW [96] и FEFLOW [72] для задач геофильтрации, и MT3DMS [146] и SEAWAT [93] для задач геомиграции. Де-факто MODFLOW является стандартом для разработки геофильтрационных моделей, в том числе и в России. Одним из важных факторов, определяющих большую популярность MODFLOW по сравнению с FEFLOW является то, что MODFLOW бесплатна и имеет открытый исходный код.

Из программ, разработанных в России, относительно широко применяется ModTech, разработанная и распространяемая ЗАО «Геолинк-Консалтинг» (ЗАО «Геолинк Консалтинг» [сайт] URL: <http://www.geolink-consulting.ru/products/modtech/> (дата обращения 15.07.2019). Однако ее развитие в настоящее время прекращено, последняя версия 3.14 выпущена в 2009 году. В настоящее время по заказу госкорпорации «Росатом» разрабатываются две программы – «Нимфа» [47] и «GeRa» [22]. Разработку пакета программ «Нимфа» ведет Российский федеральный ядерный центр Всероссийского НИИ экспериментальной физики (ФГУП РФЯЦ-ВНИИЭФ). Разработку программы «GeRa» ведет Институт безопасного развития атомной энергетики (ИБРАЭ) РАН.

В то же время сохраняется практика написания собственных программ для моделирования, если общедоступные программные комплексы не позволяют решить поставленную задачу. Это верно, в основном, для научных исследований, поскольку для подавляющего большинства практических задач функциональность уже существующих программ вполне достаточна.

Таким образом, в настоящее время основным инструментом количественного исследования и прогнозирования гидрогеологических процессов является численное моделирование геофильтрации и связанных с ней процессов переноса загрязнения и тепла подземными водами. В данной работе подразумевается именно такое значение термина «моделирование». Для аналитических расчетов термин «моделирование» в настоящее время практически не применяется. Наиболее известной программой для выполнения аналитического моделирования

является GFlow, разработанная гидрогеологом Henk Haitjema [94]. GFlow имеет ряд недостатков по сравнению с Modflow, ограничивающих его практическое применение. В первую очередь, это возможность моделировать только двумерные потоки и, следовательно, невозможность моделировать пластовые системы. Из программ, разработанных в России, модуль аналитического моделирования интегрирован в ANSDIMAT [40], начиная с версии 17 (<http://ansdimat.com/ru/ansdimat.shtml>, дата обращения 19.04.2022).

1.1.1. Этапы разработки моделей гидрогеологических объектов

Как отмечалось выше, история применения компьютеров для моделирования подземных вод насчитывает несколько десятилетий. Существуют монографии, посвященные как разработке моделей в общем [99], так и особенностям работы с конкретными программами [74]. Сегодня уже сложился рациональный порядок действий при разработке и использовании моделей гидрогеологических объектов. В этом порядке, как правило, прогнозные расчеты с оценкой их неопределённости являются завершающим этапом работы над моделью гидрогеологического объекта [57]. В работе над ней, следуя представлениям, разработанным В.М. Шестаковым [50], можно выделить следующие этапы:

1. Геофильтрационная и геомиграционная схематизация;
2. Создание вычислительной модели;
3. Калибрация и верификация модели (решение обратной задачи);
4. Выполнение прогнозных расчетов (решение прямой задачи);
5. Анализ неопределенности результатов моделирования;
6. Уточнение модели при появлении новых данных.

Схематизация – это представление существующих геологических условий в упрощенном виде, пригодном для проведения вычислений. Процесс схематизации называют сообразно рассматриваемому процессу – «геофильтрационная схематизация», «геомиграционная схематизация». В зарубежных источниках процесс схематизации называется составлением концептуальной модели (conceptual model). При схематизации определяются следующие условия [50]:

- Режим моделируемого процесса во времени
- Пространственная структура потока подземных вод
- Граничные условия
- Параметры.

Создание вычислительной модели – это воплощение составленной схемы в конкретной компьютерной программе. При этом также необходимо решить ряд задач:

- Выбрать метод численного решения дифференциального уравнения модели процесса.
- Обосновать пространственную дискретизацию расчетной сетки модели объекта.

- Выбрать временную дискретизацию, если рассматривается нестационарный процесс.
- Аппроксимировать граничные условия, источники и стоки с учетом выбранной пространственной и временной дискретизации.

Калибрация и верификация модели. После создания численной модели необходимо удостовериться, что модель воспроизводит существующие условия. Для этого производится так называемая верификация – сравнение результатов модельных расчетов с известными фактическими величинами. Если невязки между модельными и фактическими величинами слишком велики, требуется проведение так называемой калибровки модели – уточнения модельных параметров. Калибровка модели – есть способ решения обратной задачи, она заключается в подборе тем или иным методом значений необходимых модельных параметров, которые позволят воспроизвести на модели известные фактические величины моделируемого процесса (поля напоров, концентраций, температур). Подробнее методы проведения калибровки и типы величин, используемых для нее, описаны в следующих разделах данной главы.

Универсального строгого критерия допустимой величины невязок не существует. Критерий успешного завершения калибровки определяется отдельно для каждой модели на основании требуемой точности вычислений, точности определения параметров и точности используемых фактических замеров.

Прогноз. Когда невязки между модельными и фактическими величинами снижены и признаны удовлетворительными, калибровка модели считается успешно завершённой. После чего делается важное допущение, что если модель достоверно воспроизводит известное состояние подземных вод, то на этой же модели можно достоверно воспроизвести и заранее неизвестное состояние. Другими словами, на модели производятся требуемые вычисления, чаще всего – прогнозные.

Анализ неопределенности. Состояние геологической среды никогда не известно с абсолютной точностью [9]. Вся необходимая информация (геологический разрез, уровни подземных вод и пр.) известна только в отдельных точках (скважинах). Переход от отдельных точек к модели всего рассматриваемого объекта производится с помощью методов интер- и экстраполяции. Различные методы интерполяции дают различные результаты, и заранее неизвестно, какой из них – верный. Заранее неизвестно, насколько правильно проведена схематизация. Значения параметров, принятые по результатам изысканий или уточненные в процессе калибровки, не являются «истинными», а только более или менее вероятными. «Когда мы упрощаем нечто, чего мы не знаем в точности, мы не в состоянии оценить последствия нашего упрощения» [9].

По этим причинам результаты прогнозных расчетов, выполненных после калибровки модели, также не являются «истинными», а только более или менее вероятными. Заранее

неизвестно, насколько верно допущение о пригодности откалиброванной модели к выполнению прогнозных расчетов. В литературе встречаются противоположные точки зрения. В одних статьях утверждается, что калибрация позволяет оценить значения параметров и откалиброванная модель может быть использована для прогнозных расчетов [77; 81]. С другой стороны, утверждается, что успешная калибрация не гарантирует успешное прогнозирование [85]. Более жесткая точка зрения состоит в том, что калибрация «по сути бесполезна» [108].

Большинство авторов придерживается умеренной точки зрения [74; 99] Калибрация модели полезна, поскольку сужает диапазон возможных значений параметров и снижает их неопределенность. Автоматическая калибрация за счет перебора большого количества вариантов позволяет рассчитать статистические характеристики, например, доверительный интервал для оцененного значения параметра. Однако откалиброванные значения параметров не являются окончательными или «истинными» и требуется дополнительный анализ результатов. Для оценки достоверности выполненных прогнозов требуется провести анализ их неопределенности. Наиболее простой является оценка неопределенности прогноза за счет неопределенности значений параметров. Если для модельных параметров известен доверительный интервал, например, 95% вероятности, можно выполнить требуемые прогнозные расчеты при минимальных и максимальных значениях параметров в пределах их доверительных интервалов. При этом будет определен, в некотором смысле, доверительный интервал прогнозных величин. Неопределенность, связанную с другими факторами, также возможно оценить путем тестирования альтернативных сценариев – различающихся концептуальных моделей.

Уточнение модели. В той же работе Гороховского В.М. [9] утверждается, что «Использование недоказуемых и просто неправильных допущений не делает результаты моделирования обязательно неверными [...] Проблема лишь в том, что, используя такого рода допущения, мы можем оценить точность результатов моделирования только после фактической реализации сделанного прогноза». При анализе неопределенности оценивается диапазон вероятных прогнозов, но невозможно определить истинный. После наступления прогнозируемого события (ввод водозабора в эксплуатацию, поступления загрязнения к скважине и пр.) появляется возможность сравнить прогнозные величины с фактическими. За счет поступления новых данных из диапазона вероятных прогнозов выделяются «более правильные» и становится возможным дальнейшее уточнение модели. Эта идея лежит в основе постоянно действующих моделей [8; 17]. Постоянно действующая модель объекта предусматривает организацию на объекте системы мониторинга и использование данных мониторинга для постоянной актуализации и уточнения модели.

1.1.2. Понятие эффективных параметров

Для дальнейшего анализа особо следует рассмотреть концепцию эффективных параметров. Модели неизбежно являются упрощением реальных геологических объектов, фундаментальным свойством которых является пространственная неоднородность параметров, входящих в модели процессов [48]. Локальность законов переноса и, соответственно, математических моделей гидрогеологических процессов требует, чтобы необходимая геологическая информация была задана непрерывным образом, однако остаются неустранимые пробелы в знании структуры пространственной изменчивости и свойств моделируемых геологических объектов. Однако эти знания всегда дискретны, то есть параметры известны в некоторой конечной сети точек, а полевые и лабораторные методы их определения связаны с пространственным осреднением на масштабах, зависящих от опытов, то есть с масштабным эффектом. Масштабный эффект выражается в том, что испытания одних и тех же пород на образцах различного размера дают различные значения параметров. Это известная проблема, которой посвящено большое количество публикаций. Масштабный эффект проявляется при определении не только геофильтрационных и геомиграционных параметров [31], но и параметров, описывающие гидрогеомеханические процессы, например, прочностных свойств пород [44].

В зарубежной гидрогеологической литературе множество публикаций посвящено вопросу использования параметров, полученных на небольших образцах, в моделях, описывающих сравнительно большие области (так называемый «upscaling»). В данной работе проблема масштабного эффекта не рассматривается, эта тема подробно рассмотрена в обзорных работах [80; 126]. Для составления разнообразных гидрогеологических прогнозов часто необходимо знать свойства водоносного горизонта в целом. Например, понижение уровня подземных вод в водозаборной скважине зависит от проводимости [50]. Однако, при этом расчет проводимости по коэффициенту фильтрации, полученному на небольшом образце грунта (например, в «трубке Каменского») может иметь очень большую погрешность. С другой стороны, один или несколько небольших образцов могут характеризовать водоносный горизонт в целом недостаточно точно. Так, общеизвестно, что коэффициент фильтрации аллювиальных песков в каждой плановой точке может изменяться по разрезу. Использование коэффициента фильтрации, оцененного по небольшому образцу грунта для расчета проводимости в этом случае, приведет к неверному результату. Также важным условием лабораторных определений является использование образцов грунта ненарушенного сложения. Это условие не всегда удается выполнить, особенно для песчаных грунтов.

Для грунтов, имеющих трещинный характер проницаемости определение проводимости водоносного горизонта по отдельным небольшим образцам невозможно. Все трещины различаются по форме и раскрытию, и для определения проводимости породы в целом требуется

каким-либо образом усреднить параметры нескольких элементов неоднородности (в данном случае – трещин). Наиболее простым вариантом является опробование достаточно большого объема породы. Обычно принимается, что размер области опробования должен быть как минимум на порядок больше характерного размера неоднородности. При этом в трещиноватых породах характерный размер элемента неоднородности составляет первые метры, что приводит к практической невозможности обследовать образец необходимого размера в лабораторных условиях.

По описанным выше причинам многие опытно-фильтрационные работы (ОФР), такие как откачки (наливы), режимные наблюдения, и трасерные испытания проводятся в полевых условиях с целью определения свойств именно водоносного горизонта в так называемом полевом масштабе. По сути, для использования результатов подобных опытных работ необходимо решить обратную задачу – определить параметры по реакции водоносного пласта на возмущение, созданное ОФР. Аналитические решения, используемые для обработки ОФР, получены для упрощенных схем [39] – простая пространственная конфигурация (пласт-полоса, круговой пласт и т.п.), упрощенная схема неоднородности плановой и вертикальной неоднородности, представление кровли и подошвы пласта плоскостью и т.д.

Таким образом, результаты и лабораторного и полевого определения не дают истинных значений параметров в точке и точной функциональной изменчивости значений параметров в зависимости от пространственных координат. В этой связи возникает целесообразность подчеркнуть различия истинных – никогда не известных точно параметров и так называемых эффективных параметров. В.М. Гороховский в своей работе, посвященной эффективным параметрам [9] геофильтрационных моделей, использует термин «эффективные результаты моделирования»: «результаты моделирования, подчёркивая, что прогнозы реакции геологических объектов, всегда неточны. Задача может состоять только в получении наилучших, с точки зрения решения рассматриваемой прикладной задачи, назовём их эффективными, результатов». При этом «эффективность моделирования на заданной геологической модели обеспечивается назначением для неё эффективных параметров. Для определения этих параметров используются трансформирующие механизмы, обобщающие действительные свойства в эффективные параметры моделей».

Таким образом, эффективный параметр – это параметр, который при задании в модель позволяет воспроизвести известное состояние моделируемой системы в ограниченном числе точек с требуемой точностью. Эффективный параметр является упрощенным представлением истинного. Степень упрощения может быть различна и зависит от используемой модели. Например, в моделях, описываемых аналитическими зависимостями, часто принимается предпосылка о пространственной однородности и используется одно значение параметра для

всей расчетной области. Для численной модели степень упрощения параметров зависит от выбранной пространственной дискретизации, наличия сведений о состоянии водоносного горизонта и требуемой точности. Может быть назначено одно значение на всю моделируемую территорию, или составлена кусочно-однородная схема, или использованы другие, более сложные, методы учета неоднородности.

Mary Hill [98] рекомендует усложнять модель только при необходимости. Разработку модели следует начинать с возможно простой схемы неоднородности, и только при невозможности решения поставленной задачи (воспроизвести состояние системы с требуемой точностью) рассматривать варианты ее усложнения. С этой точки зрения эффективной может оказаться и замена неоднородного пространственного распределения некоторого параметра единственным значением. При этом эффективное значение этого параметра может не соответствовать ни одной из известных точек опробования и, тем не менее, быть пригодным для расчета, например, прогнозных понижений в водозаборных скважинах.

Для определения эффективных значений параметров часто используют различные методы осреднения. Например, для одномерного потока значение эффективной проводимости можно вычислить теоретически как среднегармоническое [87]:

$$T = \left(1 / N \sum_{i=1}^N T_i^{-1} \right)^{-1} \quad (1.2)$$

где T – эффективное значение проводимости для всего потока; T_i – значение проводимости в i -том блоке модели; N – количество блоков модели.

Известно, что при проведении кустовых откачек уже определяются осредненные значения параметров [2; 70]. Однако, в практике количество точек опробования всегда недостаточно для полного описания пространственной неоднородности. Выборка точек опробования может оказаться нерепрезентативной. Соответственно, осредненное тем или иным методом значение параметра по известным точкам может не являться эффективным. Рассмотрим это утверждение на синтетическом примере.

Простейшая схема – одномерный напорный изолированный фильтрационный поток. Проводимость вдоль потока изменяется, и для рассмотрения выбрано распределение проводимости, использованное в тестовой задаче, описанной далее в разделе 3.2. Поток разделен на 100 элементов, поле проводимости имеет логнормальное распределение. Дисперсия натурального логарифма проводимости равна 5.06, а средний натуральный логарифм проводимости равен -3.5, что соответствует $0.03 \text{ м}^2/\text{сут}$. Эффективное значение проводимости, рассчитанное по зависимости (1.2) составило $0.0324 \text{ м}^2/\text{сут}$. Эффективное значение проводимости, оцененное методом калибровки модели, составило $0.032 \text{ м}^2/\text{сут}$. Разница между

этими двумя значениями составляет около 1% и ей можно пренебречь. Примем в качестве «истинного» эффективного значения проводимости $0.032 \text{ м}^2/\text{сут}$.

В данном случае «эффективное значение проводимости» означает следующее. При одинаковом напорном градиенте расход потока одинаков для исходного распределения и однородного эффективного значения проводимости. Другими словами, для описываемой задачи в качестве «эффективного» принимается значение проводимости, позволяющее получить известный расход потока, который и является (в данном случае) критерием проверки правильности модели.

Теперь требуется сравнить эффективное значение проводимости со значением, полученным при осреднении ограниченного числа точек. Осреднение производилось следующим образом. Поскольку пример синтетический, распределение проводимости априори известно. Общее количество блоков модели – 100. Из ста блоков случайным образом выбирается некоторое количество – были проверены размеры выборки от 1 до 100. По значениям проводимости в выбранных блоках вычисляется среднее гармоническое. Очевидным образом, среднее значение проводимости зависит от выбранных к осреднению точек блоков. Поэтому для каждого размера выборки процедура вычисления среднего выполняется 100 раз, каждый раз выбор модельных блоков случаен. Для каждого проверенного размера выборки рассчитано сто средних геометрических значений проводимости. За счет этого можно оценить неопределенность, возникающую при оценке значения проводимости по ограниченной выборке точек опробования.

Результаты расчетов приведены на рисунке 1.1. Для иллюстрации выбраны:

- Среднее арифметическое значение из рассчитанных 100 средних геометрических. Как видно из рисунка, до размера выборки приблизительно в 10 точек даже стократное «проведение изысканий» не позволило точно оценить эффективное значение проводимости.
- Границы первого (25%) и третьего (75%) квартилей. Это интервал, в котором лежит половина всех рассчитанных среднегармонических значений. Размер этого интервала наглядно демонстрирует величину неопределенности.
- Отношение максимального значения средней проводимости к минимальному. Даже для сравнительно большого размера выборки максимальное значение средней проводимости вдвое превышает минимальное.

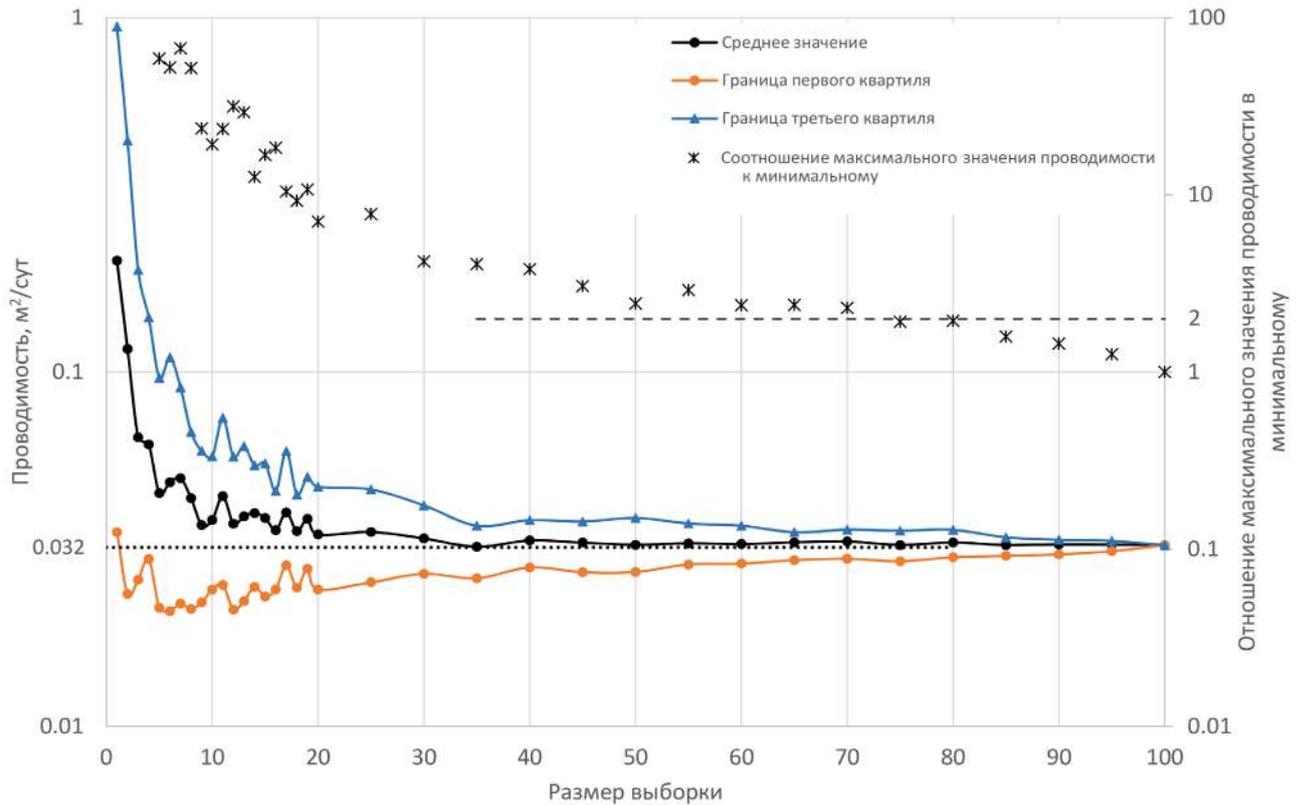


Рисунок 1.1. К оценке эффективного значения проводимости как среднего гармонического.

Таким образом, подтверждается утверждение о том, что эффективное значение проводимости можно оценить как среднее гармоническое по отдельным элементам потока. Однако для этого требуется проведение чрезвычайно подробных изысканий, невозможное при решении практических задач. Даже для рассмотренной одномерной задачи прямая оценка эффективной проводимости по отдельным «замерам» может приводить к отклонению от истинного значения проводимости до 50%.

Таким образом, учитывая, что объем и детальность изысканий чаще всего ограничены технико-экономической целесообразностью, можно констатировать, что значения параметров, полученные при изысканиях, обладают существенной неопределённостью. Их значения могут в разы отличаться от эффективных. Из этого следует важность уточнения расчетных параметров в процессе разработки модели. Другими словами, верификация (и чаще всего, последующая калибровка) является обязательным этапом разработки модели. Выполнение прогнозных расчетов на модели без выполнения ее верификации с высокой вероятностью может привести к получению недостоверных прогнозов.

1.2. Калибрация, как метод решения обратных задач

Как отмечалось в предыдущем разделе практической задачей разработки модели гидрогеологического объекта является выполнение прогноза. Как правило, этот прогноз связан с инженерным воздействием, ведущим к изменению источников-стоков, граничных условий и др. в модели процесса, протекающего на исследуемом объекте. С позиций классификации задач, описываемых уравнениями математической физики – это, так называемая прямая задача [43]. Прямая задача, в самом общем виде, состоит в определении состояния некоторой системы по ее параметрам. Более сложными являются обратные задачи, которые широко распространены в различных областях науки. Согласно одному из общих определений [42] задача относится к классу обратных, когда нужно выяснить свойства объекта по его наблюдаемым проявлениям и априорной информации, имеющейся в распоряжении исследователя.

При создании моделей гидрогеологических объектов типовая ситуация состоит в том, что, как отмечалось выше, информация о пространственной изменчивости параметров модели изучаемого процесса весьма ограничена. При этом, как правило, есть данные наблюдений за показателями, связанными с изучаемым процессом – напоры, расходы, концентрации. Коррекция параметров модели с использованием данных наблюдений является решением обратной задачи применительно к гидрогеологической модели конкретного объекта.

По сути, обработка результатов опытно-фильтрационных работ (ОФР) является решением обратной задачи. После проведения опытной откачки становятся известны понижения уровней подземных вод, и требуется определить величину проводимости и других параметров, которые обусловили именно такие понижения, какие были зафиксированы. Аналитические решения, используемые для обработки ОФР, получены для упрощенных схем [39]. Обратные задачи, решаемые на численных геофильтрационных моделях, позволяют оценить параметры более сложных систем. Математические модели позволяют учесть произвольные конфигурации зон неоднородности, плавное изменение параметров, рельеф поверхностей слоев и прочие особенности рассматриваемого объекта.

Сам процесс решения обратной задачи у разных авторов может иметь различные название. Поскольку целью обратной задачи является определение значений некоторых параметров, используются термины «идентификация» или «оценка» параметров. В англоязычной литературе это *parameter identification* (например, в [144]) и *parameter estimation*, соответственно [63]. Применительно к решению обратных задач с помощью математических моделей используется термин «*model calibration*» [99]. В русском языке используется термин «калибрация (или калибровка) модели» [28; 30].

Подходы к решению обратных задач можно разделить на два типа – точные (прямые), когда напрямую ищется точное решение для определения искомым параметров (в англоязычной литературе «direct») и приближенные (косвенные), когда решение не выводится напрямую из исходной модели («indirect»). Прямую задачу можно выразить как $F(K)=h$, где F - некоторая функция, связывающая параметры системы (например, коэффициент фильтрации K) и моделируемые величины (например, напор подземных вод h). В этом случае обратная задача может быть сформулирована в виде $K=F^{-1}(h)$, при условии, что h известны для всего пространства модели [147]. Точное решение, преимущественно, возможно найти для аналитических моделей. Точные аналитические решения для обратных задач, связанных с опытно-фильтрационными работами, разрабатываются уже давно. Существует много подробных сборников аналитических решений обратных задач для обработки результатов опытно-фильтрационных работ, например, [39]. Для численной модели получить точное решение обратной задачи практически невозможно [135]. С применением прямых методов существует и другая проблема – очень высокая чувствительность к ошибкам измерения состояния системы. В связи с этим в настоящее время используются приближенные решения, основанные на калибровке моделей. Иными словами - калибровка модели, по существу, есть приближенный метод решение обратной задачи.

1.2.1. Прямые методы решения обратных задач

Проблему чувствительности прямых методов к ошибкам стоит продемонстрировать конкретном примере. Как известно [50], уравнение фильтрации подземных вод для планового потока можно записать как

$$\frac{\partial}{\partial x} T(x, y) \frac{\partial H}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} T(x, y) \frac{\partial H}{\partial y} + w = 0 \quad (1.3)$$

Пусть неизвестная $T(x,y)$ дифференцируемая функция, а распределение $H(x,y)$ известно. Тогда, переписав уравнение (1.3) относительно неизвестной T имеем:

$$T(A_x + A_y) + \frac{\partial T}{\partial x} B_x + \frac{\partial T}{\partial y} B_y + w = 0 \quad (1.4)$$

$$A_x = \frac{\partial H}{\partial x}; A_y = \frac{\partial H}{\partial y}; B_x = \frac{\partial A_x}{\partial x}; B_y = \frac{\partial A_y}{\partial y}$$

Таким образом, при соответствующих граничных условиях уравнение (1.4) можно решить, если известны первые и вторая производная функции $H(x,y)$. Проблема состоит в том, что функция H может быть известна по измерениям по достаточно редкой сети точек, а кроме того, в каждой точке напор измеряется с ошибкой. Это приводит к существенным трудностям при использовании прямого метода оценки проводимости по уравнению (1.4).

Покажем возникающие трудности при использовании прямого метода определения проводимости путем решения уравнения геофильтрации относительно неизвестной функции проводимости на примере модельного случая. Для рассмотрения выбрана модель одномерного стационарного потока без инфильтрационного питания как самая простая для анализа. Также именно в одномерном потоке наиболее сильно сказывается влияние фильтрационной неоднородности на изменении напора, то есть априори определить проводимость по перепаду напоров должно быть проще, чем для других схем. Примем одномерный поток длиной L , на границах которого заданы напоры H_1 и H_2 . Из закона Дарси следует:

$$T(x) = - \frac{q}{\frac{\partial H}{\partial x}(x)} = \frac{I_0 T_{ef}}{\frac{\partial H}{\partial x}} \quad (1.5)$$

$$I_0 = \frac{H_0 - H_L}{L}; T_{ef} = q / I_0$$

Где T_{ef} – эффективная проводимость пласта, то есть та проводимость, при которой условно однородный пласт будет иметь такой же расход, как неоднородный пласт при задании на границах градиента I_0 . Пусть локальный градиент напора определяется по формуле численного дифференцирования по соседним точкам наблюдения:

$$\frac{\partial H}{\partial x} = I_x \approx \frac{H_i - H_{i+1}}{\Delta x_i} \quad (1.6)$$

Тогда уравнение (1.5) можно переписать в виде:

$$T^* = T(x_{i+1/2}) / T_{ef} = \frac{\Delta x_i}{L} \frac{H_0 - H_L}{H_i - H_{i+1}} \quad (1.7)$$

То есть, согласно (1.6) зная локальный градиент в каждой точке можно определить отношение проводимости в точке к эффективной проводимости. Пусть значения напора измеряются со случайной некоррелированной ошибкой, имеющее нормальное распределение с нулевым средним и дисперсией σ^2 . Тогда распределение ошибок перепада напоров между соседними точками будет иметь также нулевое среднее и дисперсию $2\sigma^2$. Применительно к (1.7) имеем стандартную ошибку определения проводимости:

$$\sigma_{T^*} = \frac{\sqrt{2} \cdot \sigma}{H_i - H_{i+1}} \left(\frac{I_0}{I_x} + 1 \right) \quad (1.8)$$

Анализ зависимости (1.8) показывает, что ошибка относительной проводимости $T^* = T(x)/T_{ef}$ будет тем больше, чем с большей детальностью требуется оценить проводимость по длине потока, то есть чем меньше расстояние между точками i и $i+1$. Уменьшение расстояния ведет к уменьшению перепада напоров между этими точками и, соответственно, к увеличению ошибки

определения проводимости. Среднюю длину зоны неоднородности, для которой можно определить проводимость с заданной точностью из (1.8) можно оценить как

$$\Delta x_i \approx \frac{2.8\sigma}{I_0\sigma_T} \quad (1.9)$$

Примем разумный критерий, что перепад напоров между соседними точками измерений должен быть на порядок больше, чем стандартная ошибка измерений. При характерной ошибке измерения уровней подземных вод равной 1 см, средняя относительная ошибка измерения проводимости по (1.8) будет составлять порядка 0.28.

Исходя из этих значений при среднем градиенте потока порядка 10^{-2} - 10^{-3} , минимальная длина зоны, для которой рассчитывается проводимость, будет порядка 10-100м. То есть для оценки проводимости с точностью 30% в естественном потоке подземных вод пространственное разрешение может быть десятки и сотни метров. А более точная оценка проводимости требует увеличение размера зон.

Согласно уравнению (1.8) наибольшая ошибка будет при определении зон повышенной проводимости, так как в этих зонах снижен локальный градиент. Например, при локальной проводимости, превышающей среднюю на порядок, ошибка ее определения будет превышать среднюю в 5.5 раз.

Таким образом, при использовании прямого метода решения обратной задачи малые ошибки в измерении напоров могут приводить к большим ошибкам в оценке проводимости. Это верно даже для наиболее чувствительной к изменению проводимости схеме наблюдений в одномерном плановом потоке. При этом разрешимость метода такова, что точность расчётных значений обратно пропорциональна размерам зон, для которых эти значения рассчитываются.

1.2.2. Приближенные методы решения обратных задач

Все обратные задачи в гидрогеологии относятся к классу некорректных [78] задач. Понятие некорректных задач широко используется в математической физике, при решении некорректных задач возникают проблемы неединственности и неустойчивости решения [43]. С этими проблемами борются, снижая количество оцениваемых параметров и сужая допустимый интервал их значений. Приближенные решения обратных задач развивают уже довольно давно, и к настоящему времени разработано несколько различных подходов. Большинство используемых в гидрогеологии подходов к приближенному решению обратных задач основана на использовании математических моделей. Различные подходы схожи в общих чертах, и объединяются под названием «калибрация (калибровка) моделей».

Суть калибровки состоит в следующем. Для описания интересующего объекта создается его расчетная математическая модель. Результаты моделирования (напоры подземных вод,

расходы рек и т.д.) сравниваются с фактическими измерениям, проведенными на объекте. Далее вводится существенное предположение, что выбранная геофильтрационная схема верна. Тогда расхождение наблюдаемых и моделируемых величин определяется только лишь недостаточными знаниями о геофильтрационных параметрах. Поэтому при расхождении результатов моделирования с фактическими данными тем или иным образом изменяется заложенное в модель пространственное распределение параметров и повторяется предыдущий шаг. Изменение параметров производится до достижения приемлемого сходства расчетных и фактических величин. По сути, производится подбор параметров. Такой процесс последовательного многократного изменения параметров и называется калибрацией. Если калибрация разработанной модели не позволяет получить приемлемое расхождение результатов моделирования и фактических данных, это может свидетельствовать о необходимости изменения выбранной геофильтрационной схемы.

Практических методов калибрации моделей существует множество. В целом можно выделить два различных подхода – ручная и автоматическая калибрация. При ручной калибрации специалист вручную изменяет параметры модели, и самостоятельно оценивает «качество» результатов моделирования. В этом случае формальные критерии оценки расхождения модельных и фактических величин дополняются экспертным мнением специалиста о результатах моделирования. Поиск оптимального сочетания параметров производится интуитивно или исходя из общих соображений о моделируемых процессах. Основным недостатком ручной калибрации является высокая трудоемкость. Вручную можно перебрать сравнительно небольшое количество вариантов с небольшим числом калибруемых параметров.

Автоматическая калибрация реализуется с помощью отдельных программ, которые в автоматическом режиме изменяют параметры уже разработанной модели, считывают результаты моделирования и по формальным критериям оценивают расхождение с фактическими замерами. Поиск оптимального сочетания параметров производится по формальным методам оптимизации с целью уменьшения расхождения модельных и фактических величин. Конкретные методы автоматической калибрации различаются способом пространственного задания параметров в модель, подходом к учету неоднородности, алгоритмами изменения параметров, допустимым количеством одновременно обрабатываемых параметров, критериями оценки расхождения расчетных и фактических величин. Пространственная неоднородность в распределении параметров является одной из главных проблем при решении обратных задач в целом. При калибрации модели, воспроизводящей неоднородный водоносный горизонт для описания неоднородности может потребоваться оценить большое количество отдельных параметров. Например, проводимость водоносного горизонта в целом может быть отражена заданием десятков или сотен значений проводимости, каждое из которых может быть предметом

калибрации, то есть отдельным независимым параметром. Наиболее полные обзоры существующих методов автоматической калибрации моделей представлены в работах [83] и [147]. Преимуществом методов автоматической калибрации является меньшая трудоемкость, поскольку большая часть рутинных операций выполняется автоматически. За счет большого количества проверяемых вариантов может быть проведен статистический анализ параметров модели. В частности, может быть оценена попарная корреляция подбираемых параметров, доверительные интервалы для итогового значения каждого параметра. К недостаткам автоматической калибрации можно отнести большие затраты машинного времени, поскольку требуются (в зависимости от количества параметров и сложности условий моделируемого объекта) десятки и сотни запусков модели. Также, поскольку подбор параметров идет по формальным критериям, без понимания физического смысла параметров, в процессе калибрации могут (особенно при неаккуратном задании общих настроек калибрации) быть получены сочетания значений параметров, противоречащие здравому смыслу. Например, равные коэффициенты фильтрации для песков и глин или значения коэффициентов фильтрации, на порядки превышающие ожидаемые.

Начиная с 70-х годов прошлого столетия в гидрогеологии для анализа геофильтрационной неоднородности широко используется стохастический подход [84], основанный на представлении поля геофильтрационных параметров, как случайного поля и использования для его описания и моделирования методов геостатистики. Этот подход в 80-х годах начал применяться и для решения обратных задач. В 1983 году в работе [105] был предложен геостатистический подход к решению обратных задач геофильтрации. В этом случае определяются не сами значения проводимости (которых, как указано выше, могут быть сотни), а статистические параметры случайного пространственного поля проводимости и ожидаемый его конкретный вид (реализацию) в рамках моделируемого объекта. В указанной работе предлагается определять параметры вариограммы для интерполяции поля проводимости методом универсального кригинга – наличие тренда, величина дисперсии проводимости и характерные длины пространственной корреляции. Ключевым элементом данного метода является так называемая линеаризация уравнения геофильтрации, то есть представление напоров как линейной функции от координаты и логарифма проводимости. В указанной статье рассматривается одномерный поток, впоследствии геостатистический подход был успешно применен для двумерного потока [100].

Таким образом достигается существенное снижение количества оцениваемых параметров. Кроме того, оцениваемые параметры не зависят от выбранной для конкретной модели сеточной дискретизации. С другой стороны, линеаризация допустима для потоков с небольшой дисперсией логарифма проводимости. Соответственно, геостатистический подход неприменим для оценки

высоко неоднородного поля проводимости. Также проблематичным является использование этого подхода для трехмерных задач, которые становятся все более распространенными. На момент разработки геостатистического подхода очень важным преимуществом была его низкая вычислительная сложность, обусловленная линеаризацией. В настоящее время мощность вычислительной техники достаточна для проведения гораздо более сложных расчетов, сводя на нет это преимущество. Кроме того, геостатистический подход применим только к стационарному потоку [64]. Все вышеперечисленное привело к тому, что геостатистический подход в чистом виде в настоящее время почти не используется [147].

Другим способом снижения количества параметров является зонирование (дискретизация). При этом упрощается пространственная неоднородность. Геофильтрационная среда рассматриваемого объекта разделяется на некоторое количество зон, в пределах каждой из которых значение параметра принимается постоянным. Часть (или все) выделенных параметров уточняется в процессе калибрации. Зоны могут выделяться независимо для каждого параметра. Зоны выделяются на основании известной информации о геологическом строении и свойствах пород в процессе геофильтрационной схематизации. При этом определяющим фактором является экспертное мнение специалиста, проводящего зонирование, базирующееся на его априорных представлениях о формировании неоднородности и результатах анализа полевой информации о исследуемом объекте. Не существует четких критериев, позволяющих однозначно определить количество и конфигурацию выделяемых зон. Довольно часто выделяют небольшое количество зон, единицы. Некоторые параметры задаются однородными во всей модели или по слоям. Обычно это обусловлено слабой изученностью объекта, недостаточной для создания детальной модели. Очевидно, что разделение водоносного горизонта на небольшое число однородных зон, не соответствует реальному изменению параметров в пространстве. Даже в однородных отложениях параметры случайным образом изменяются в пространстве [84]. Тем не менее, как обсуждалось выше, замена неоднородного поля некоторого параметра единым эффективным значением может быть вполне допустима.

Модели с дискретизированными полями параметров позволяют получать хорошие результаты. Под «хорошим результатом» здесь подразумевается достаточная схожесть результатов моделирования и натуральных наблюдений, позволяющая с использованием той же модели строить обоснованные прогнозы. В практике геофильтрационного моделирования дискретизация до сих пор является основным методом учета неоднородности. На это обращают внимание авторы обзорных работ, посвященных стохастическим методам анализа процессов фильтрации и миграции [67; 71]. Они указывают чрезмерное упрощение реального строения геологической среды основным недостатком зонирования. В то же время, упрощение реальных условий является неотъемлемой частью моделирования [141]. Более того, рекомендуется

начинать разработку модели с возможно более простой схемы, повышая детальность по необходимости [98]. Преимуществами этого подхода, обеспечившими широкое распространение в практике, является высокая скорость разработки моделей и сравнительно низкие требования к вычислительной мощности. К тому же, как уже упомянуто, детальность разведки часто не дает оснований для разработки сложных моделей.

Дальнейшим развитием геостатистического подхода является метод пилотных точек (pilot points method), предложенный в 1984 году [114]. Он заключается в том, что непрерывное пространственное распределение параметров задается с помощью интерполяции на основе нескольких точек. За основу для интерполяции берутся результаты полевых или лабораторных определений интересующих параметров, так называемая априорная информация. В указанной статье рассматривается поле проводимости водоносного горизонта, и положение пилотных точек определяется местами проведения опытных откачек. В то же время, возможно введение фиктивных пилотных точек, используемых для интерполяции, но не соответствующих априорной информации. Поскольку изменение пилотных точек непосредственно приводит к изменению интерполированного поля, они могут являться предметом калибровки. При калибровке возможно изменять как значения параметра в пилотных точках, так и положение самих точек. Необходимо отметить, что допустимо калибровать модель как по фиктивным точкам, так и по априорным [64]. Фиктивные точки редактируют при поиске наилучшего пространственного распределения, их свойства можно менять произвольно. Возможность изменять значения параметров в априорных пилотных точках обосновывается существованием погрешностей и ошибок при определении этих параметров.

Метод пилотных точек позволяет прямо учитывать результаты определений параметра в точке. При этом воспроизводится непрерывное изменение параметра в пространстве путем интерполяции. Если для интерполяции используется кригинг, то этот метод учитывает представления о пространственной корреляции исследуемого параметра через задание вариограмм для кригинг-интерполяции.

В процессе решения обратной задачи к исходным последовательно добавляются новые фиктивные точки, которые и называются пилотными. Таким образом, каждый шаг создается новое, более неоднородное распределение параметра. Пилотные точки добавляются таким образом, чтобы модельные уровни меньше расходились с наблюдаемыми. Преимуществом метода пилотных точек является возможность отразить неоднородность любого масштаба. Определение проводимости водоносного горизонта связано с проведением опытно-фильтрационных работ. На практике значение проводимости определяется в небольшом количестве точек, обычно это единицы. Соответственно, интерполированное распределение

проводимости получается очень гладким. За счет задания дополнительных точек возможно воспроизвести более выраженную неоднородность, чем только по исходным данным.

Дальнейшим развитием геостатистических методов стало применение к калибровке моделей подземных вод метода Монте-Карло. В основе метода Монте-Карло лежит широко применяемая идея параллельного создания множества равновероятных полей пространственного распределения параметров и последующего сравнения результатов моделирования на этих реализациях. Для получения множества пространственных распределений параметров используется процедура условного геостатистического моделирования случайных полей с обуславливанием этих полей по выборке исходных данных опробований [61; 125]. Поскольку идея достаточно универсальна, метод Монте-Карло использовали для усовершенствования ряда существующих методов, в том числе и пилотных точек. Основным недостатком методов на основе Монте-Карло является необходимость просчета большого числа реализаций одной и той же модели, что требует значительных вычислительных ресурсов и может занять много времени на распространенных в настоящее время персональных компьютерах.

На несколько другом подходе основан метод последовательной автокалибровки (sequential self-calibration, SSC), предложенный в конце 1990-х годов [90]. В работе [82] описан метод SSC на примере проводимости и водоотдачи. Начальные поля логарифма проводимости Y и логарифма водоотдачи Z создаются в соответствии с известными результатами полевых исследований. При нехватке данных используется стохастическая генерация полей на основе статистических параметров, известных для аналогичных геологических условий. Создается несколько равновероятных реализаций полей Y и Z . После этого для принятого пространственного распределения параметров решается прямая задача для каждого из вариантов и сравниваются модельные и наблюдаемые значения. Если сходжение признано неудовлетворительным, создается поле поправок ΔY для логарифма проводимости и ΔZ для логарифма водоотдачи. Поля поправок создаются интерполяцией на основе ряда точек (аналогично методу пилотных точек), которые могут быть как заранее заданы, так и выбраны случайно. Авторами рекомендуется использовать равномерное распределение точек по сетке. Одним из ряда методов, перечисленных в статье [83], поля поправок создаются с тем, чтобы приблизить модельные результаты к имеющимся наблюдениям. Создается по одному полю поправок ΔY и ΔZ , которые накладываются на текущие поля Y и Z , после чего начинается следующая итерация, с решения прямой задачи. Такой подход позволяет ускорить сравнение различных реализаций полей параметров. Также метод SSC позволяет объединить неоднородность различного масштаба, накладывая на исходные поля, отражающие крупные элементы неоднородности, поля поправок, построенные на основе более мелкой сетки точек.

Поскольку цель разработки различных методов калибровки моделей одна, различия между отдельными методами могут быть не столь значительными. Например, существуют работы, объединяющие метод пилотных точек и последовательной автокалибровки [54]

Для учета известных особенностей геологического строения рассматриваемого объекта разрабатываются методы с использованием так называемых обучающих образов. Обучающие образы позволяют создавать поля параметров не только на основе общих статистических характеристик, но и учитывать ожидаемую геологическую структуру. Например, это может быть характерная структура речных отложений с учетом различных фаций. Или трещинно-блоковая среда, для которой, очевидно, невозможно описать каждую трещину. Способы реализации обучающих образов различны и приведены, например, в работах [68; 69; 113].

Все вышеперечисленные методы, главным образом, различаются способом отражения в модели реально существующей пространственной неоднородности. В основе же всех этих методов лежит общий принцип – сравнение результатов моделирования с наблюдениями и последовательный перебор различных реализаций модели до достижения удовлетворительного сходства. И авторы обзорных работ [83] и [147] делают вывод, что эффективность всех этих методов вполне сопоставима.

С точки зрения практики калибровки можно выделить два подхода. Для калибровки моделей в повседневной практике используются ставшие стандартом де-факто программы PEST [73] и UCODE [120]. Эти программы интегрированы в широко известные прикладные программные комплексы для разработки геофильтрационных и геомиграционных моделей, таких как Processing Modflow, Visual Modflow, Groundwater Modeling System. В них для поиска значений параметров используется метод Левенберга — Марквардта [10], дополненный регуляризацией по Тихонову [43] и некоторыми другими техниками.

С другой стороны, для некоторых задач другие методы могут подойти лучше. Ранее, в период начального развития математического моделирования в гидрогеологии было нормой написание каждым исследователем своей собственной программы для моделирования. Например, в 1981 году в Геологической службе США (USGS) использовалось до 500 различных версий программ для геофильтрационного моделирования [115]. В настоящее время потребность в самостоятельной разработке программного обеспечения возникает реже [102]. Тем не менее, по тематике калибровки продолжают публиковаться работы, использующие оригинальные авторские разработки, некоторые из которых получают дальнейшее развитие. Изучаются возможности применения к решению гидрогеологических задач методов из других отраслей знания. Изучаются способы более эффективно использовать растущую вычислительную мощность, обеспечиваемую серийными персональными компьютерами, а также доступными суперкомпьютерами. В качестве отдельных примеров можно привести несколько работ. В статье

[130] описывается совмещение нескольких методов оптимизации для более полного использования вычислительной мощности суперкомпьютеров. В статьях [53; 148] описывается принцип работы и применение программ, специально разработанных для обработки результатов гидравлической томографии. В работе [97] описан опыт доработки существующего программного обеспечения для выполнения калибровки с помощью облачных вычислений.

Проблема заключается в том, что большинство новых разработок мало применимы к производственным задачам. Это связано с рядом проблем – разрабатываемые программы могут иметь узкую специализацию, сложными в использовании и изучении другими специалистами помимо автора, требовать трудоемкой подготовки входных данных и т.д. По указанным причинам в данной работе для калибровки моделей используются упомянутые выше широко доступные и используемые программы PEST и UCODE.

1.3. Типы данных, используемые при решении обратных задач

1.3.1. Напоры подземных вод

В качестве наблюдений для калибровки моделей могут применяться различные типы данных. Теоретически, любые наблюдения, проведенные в полевых условиях, могут быть использованы для уточнения создаваемой модели. Самым распространенным типом наблюдений являются замеры уровней и напоров подземных вод.

Долгое время замеры стационарных уровней были единственным используемым типом наблюдений. В 1935 году Ч. Тейс опубликовал статью [136], посвященную изменению пьезометрической поверхности подземных вод во времени при откачке. Этим были заложены теоретические основы использования уровней, замеренных в наблюдательных скважинах в течение опытной откачки, а не только после наступления стационара, для оценки параметров. Тейс, как и Дюпюи, рассматривал простейшую модель водоносного горизонта – изолированный, однородный, горизонтальный пласт. Впоследствии другими учеными были получены уравнения, описывающие изменение пьезометрической поверхности при откачке для более сложных условий.

В 1960-х годах начали появляться обзорные работы, посвященные теории и методам опытно-фильтрационных работ (ОФР) [7; 107] и полевым методам определения емкостных и фильтрационных параметров пород. В 1970-х годах накопился достаточный практический опыт, и стали издаваться методические указания по проведению и обработке ОФР [2; 133]. Опытные откачки были основным среди всех используемых ОФР способом определения необходимых параметров, и понижения уровней – основным типом наблюдений.

Только в конце 1970-х годов, с увеличением масштабов гидрогеологических исследований начали рассматривать возможность использования длительных наблюдений за естественными уровнями и напорами подземных вод для изучения их динамики [32]. В настоящее время в России

режимные наблюдения за уровнями подземных вод ведутся на многих локальных участках существенного инженерного воздействия на подземные воды. В первую очередь это водозаборы, места закачки токсичных отходов и подтоварных вод, участки карьерной добычи полезных ископаемых и другие объекты. Существует также система государственного мониторинга подземных вод. Режимные наблюдения дополняют ОФР и позволяют определить некоторые составляющие водного баланса изучаемого объекта. Годовые и многолетние наблюдения за уровнями подземных вод позволяют определить параметры взаимосвязи подземных и поверхностных вод, величину инфильтрационного питания [3; 51], фильтрационные свойства водовмещающих пород. Решение обратных задач на основе режимных наблюдений отличается от обработки результатов ОФР. Поэтому, несмотря на единство размерности и измеряемой величины, можно считать режимные замеры уровней отдельным типом данных, не совпадающим с замерами уровней во время проведения различных ОФР.

Замеры уровней в рамках режимных наблюдений производятся с некоторой периодичностью – раз в неделю, месяц. Использование автоматических уровнемеров позволяет вести измерения уровней вплоть до нескольких раз в секунду. При отсутствии автоматических уровнемеров и большими расстояниями между скважинами наблюдательной сети (например, в пределах административной области) замеры в разных скважинах производятся в разные дни. Также может не совпадать периодичность замеров для разных наблюдательных пунктов. Использование разновременных замеров, особенно при моделировании стационарного режима, может приводить к возникновению ошибок интерпретации уровней. Ошибка возникает за счет того, что уровни подземных вод могут существенно изменяться в течении годового цикла. Весной, в период снеготаяния формируется интенсивное инфильтрационное питание, которое приводит к быстрому росту уровней подземных вод. Зимой, при промерзании грунта с поверхности, инфильтрационное питание отсутствует, что приводит к стабильному снижению уровней. Летом и осенью колебания уровней подземных вод связаны с неравномерностью выпадения атмосферных осадков во времени. Таким образом, замеры, выполненные в разное время, характеризуют различное состояние подземных вод и, строго говоря, не могут быть использованы для оценки напорного градиента, построения карт гидроизогипс и для других подобных целей.

Применяется три основных метода учета ошибок, связанных с внутригодовым изменением уровней. Первый метод состоит в проведении единовременных замеров в кратчайшие сроки по всем наблюдательным скважинам. Для этого выбирается период летней или зимней межени, когда заведомо не ожидается резкого изменения положения уровней подземных вод. При разнице между замерами в один-два дня в межень их можно принять единовременными.

Второй метод – метод приведения уровней. Требуется наличие хотя бы одной наблюдательной скважины, в которой ведутся регулярные непрерывные измерения. Это позволяет оценить внутригодовую изменчивость уровней подземных вод на изучаемом объекте. Предполагается, что в рамках одного объекта (например, речного бассейна) уровни подземных вод изменяются закономерно. При наличии единичных разрозненных замеров сопоставление уровней в скважинах на известные даты позволяет восстановить отсутствующие замеры и определить положение уровней подземных вод во всех скважинах на необходимый момент времени.

Третий метод – осреднение. При моделировании стационарного среднемноголетнего положения уровней подземных вод все известные замеры по каждой скважине усредняются. Для каждой усредненной таким образом отметки уровня рассчитывается стандартная ошибка, характеризующая амплитуду годовых колебаний. При моделировании сравнение расчетных уровней производится с осредненными замерами, и величина допустимой невязки определяется с учетом ошибки, связанной с осреднением.

С данными режимных наблюдений схожи замеры уровней при бурении скважин. При проведении разведки и инженерных изысканий во всех новых скважинах замеряется глубина вскрытого и установившегося уровня подземных вод. Замер производится во время или вскоре после завершения буровых работ. С этим связаны следующие особенности. Не предполагается проведения единовременных замеров по разным скважинам, дата замера определяется датой бурения скважины. При недобросовестном ведении буровых работ и их документации может быть не выдержано время, необходимое для установления в скважине уровня подземных вод. Может быть измерен только вскрытый уровень, без установившегося. По этим причинам уровни, измеренные при бурении скважин, являются менее достоверными, чем измеренные в ходе режимных наблюдений.

1.3.2. Расход поверхностных водотоков

Существует широко известная проблема, которая заключается в следующем. Опираясь на одни только уровни подземных вод невозможно определить одновременно фильтрационные параметры водоносного горизонта и величину инфильтрации. Рассмотрим эту проблему на примере инфильтрационного потока от водораздела до реки. Возьмем самый простой случай – поток одномерный, стационарный, напорный, однородный. Длина потока от реки до водораздела составляет L , сверху поступает инфильтрационное питание с расходом w . Поток разгружается в совершенную реку, отметка воды в реке H_0 . При этих условиях выражение для напора в любой точке потока с координатой x может быть записано как [50]:

$$H_x = H_0 + \frac{wx}{T} \left(L - \frac{x}{2} \right) \quad (1.10)$$

Отсюда видно, что напор в любой точке зависит от соотношения расхода инфильтрации и проводимости водоносного горизонта. Для определения этих величин по отдельности требуются дополнительные данные.

Для решения этой проблемы часто используют расход поверхностных водотоков (рек и ручьев). Точнее, непосредственно используется величина разгрузки подземных вод в поверхностные, которая определяется по приращению расхода реки на некотором участке русла. Известная величина разгрузки подземных вод позволяет составить водный баланс рассматриваемого участка и, в данном примере, независимо оценить величину инфильтрации.

В отечественной литературе уже достаточно давно разработаны методы расчленения гидрографов рек, позволяющие выявить, какая именно часть расхода поверхностных водотоков обеспечивается подземными водами, например [25], [35]. Необходимость учета расхода поверхностных водотоков при изучении подземных вод постоянно подчеркивается в современной литературе, например [58; 118; 143], связанной с обоснованием моделей подземных вод. В настоящее время активно продолжают разрабатываться методы учета взаимодействия подземных и поверхностных вод в моделях [89].

Таким образом, расход (изменение расхода за счет разгрузки или поглощения) водотоков является важным типом исходных данных для калибровки моделей в гидрогеологии при моделировании взаимосвязи поверхностных и подземных вод.

1.3.3. Концентрации растворенных веществ

Во второй половине XX века перед гидрогеологами стали возникать другие задачи помимо обеспечения водоснабжения. Развитие промышленности привело к загрязнению подземных вод, и необходимости прогнозировать движение загрязненных подземных вод. Загрязнение подземных вод за счет промышленных источников может быть разнообразным [31]. Подземные воды могут быть загрязнены нефтепродуктами, радионуклидами, поверхностно-активными веществами, кислотами, тяжелыми металлами и т. д. С сельским хозяйством ассоциировано бактериальное, нитратное загрязнение, повышение содержания макро- и микрокомпонентов за счет использования удобрений.

Другим примером является то, что значительное количество водозаборов в мире находятся под угрозой загрязнения минерализованными водами. Это водозаборы, расположенные вблизи морского берега, эксплуатация которых может усилить проникновение минерализованной морской воды в водоносный горизонт [52]. Схожая проблема встречается в областях с аридным климатом, где подземные воды часто имеют повышенную минерализацию и пресные воды распространены спорадически. В артезианских бассейнах за счет снижения уровней, вызванного

работой водозаборов возможно усиление перетока минерализованных вод из смежных (обычно – более глубоких) водоносных горизонтов.

Поэтому появилась необходимость отслеживать качество подземных вод и его изменение за счет естественных и антропогенных источников. Качество воды обычно характеризуется концентрацией растворенных веществ. Это может быть как общая минерализация, так и концентрация какого-либо конкретного вещества. Концентрации, так же как и уровни, могут быть измерены и впоследствии использоваться для решения обратных задач, и являются еще одним типом данных. Задачи, связанные с движением (миграцией) растворенного вещества с фильтрационным потоком, называются миграционными (в зарубежной литературе «transport»).

Возникает задача прогнозирования возможности загрязнения отбираемых подземных вод. В Российской Федерации СанПиН 2.1.4.1110-02 регламентирует определение зон санитарной охраны (ЗСО) источников водоснабжения. Согласно этому документу, границы второго и третьего поясов ЗСО определяются гидродинамическими расчетами. Расчет движения растворенных веществ в подземных водах требует учета действительной скорости движения вместо обычно используемого расхода фильтрационного потока. Вычисление действительной скорости, в свою очередь, требует определения ряда новых, миграционных, параметров, в первую очередь – активной пористости. На миграцию вещества в подземных водах влияют такие процессы, как сорбция, гидродисперсия, диффузия [50]. Эти процессы никак не отражаются на фильтрационном потоке, что и обуславливает необходимость использования для их изучения новых типов наблюдений (дополнительно к уровням). Все необходимые миграционные параметры водовмещающих пород могут быть определены в лабораторных условиях при изучении образцов пород. Но за счет уже упоминавшегося масштабного эффекта полевые опытно-миграционные опробования позволяют получить более точные значения параметров.

Скорость геомиграции, очевидным образом, зависит от скорости движения фильтрационного потока. Также, поскольку растворенный мигрант занимает только часть общего объема породы, важным параметром является активная пористость. И в-третьих, на процесс геомиграции накладывается процесс гидродисперсии, приводящий к размытию фронта движения мигранта. Здесь уравнение конвективного переноса вещества в одномерном фильтрационном потоке приведено по В.М. Шестакову [50]:

$$n \frac{\partial c}{\partial t} + v \frac{\partial c}{\partial x} = D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} \quad (1.11)$$

где c – концентрация растворенного вещества; n – активная пористость породы; v – скорость фильтрации; D – коэффициент гидродисперсии.

Замеры концентраций, так же, как и уровни, можно условно разделить на две группы – режимные наблюдения и замеры, выполняемые во время полевых опытных работ. Одним из распространенных опытно-миграционных опробований (ОМО) является трасерное опробование. Оно заключается в запуске в поток подземных вод некоторого индикатора, изменение концентрации которого затем отслеживается в наблюдательных скважинах. Н. Н. Веригин [7] упоминает, что он проводил подобные опыты уже в 1936 году. Отслеживаемые изменения концентрации индикатора в наблюдательных скважинах позволяют решить обратную задачу по оценке миграционных параметров. Определяемые параметры зависят от постановки опыта, но рассмотрение методики трасерных испытаний выходит за рамки данной работы.

Режимные наблюдения за концентрациями обычно являются составной частью мониторинга подземных вод. В.А. Мироненко и В.Г. Румынин [29] указывают необходимость их постановки для контроля загрязнения подземных вод. Режимные наблюдения по сравнению с ОМО имеют ряд преимуществ, обусловленных тем, что они имеют больший масштаб, как временной, так и пространственный. Процессы загрязнения обычно развиваются сравнительно медленно, и охватывают гораздо большие участки, чем это возможно при проведении ОМО. За счет этого сглаживаются пространственно-временные масштабные эффекты, состояние фильтрационного потока соответствует прогнозным условиям, проявляются факторы, которые невозможно учесть за счет коротких опытов (распад наблюдаемого вещества, гравитационная дифференциация исходного раствора, изменение проницаемости отложений за счет взаимодействия с загрязнением). Из отмеченных преимуществ вытекает принципиальная возможность оценки тех показателей, которые практически не определяются опытными опробованиями [31]. Это подтверждает целесообразность рассмотрения режимных концентраций как отдельного типа данных.

1.3.4. Температура подземных вод

Сравнительно хорошо в последнее время разработано использование тепла в качестве трасера. Появление дешевых и надежных логгеров упростило измерения температуры воды в скважинах, в связи с чем растет интерес к ее использованию в гидрогеологических исследованиях. Перенос тепла в подземных водах происходит схожим образом с переносом растворенного вещества, и описывается схожими зависимостями [31]. Уравнение переноса тепла с потоком подземных вод широко известно, здесь приводится по обзорной работе [56]:

$$\frac{k_e}{\rho c} \nabla^2 T - \frac{\rho_w c_w}{\rho c} \nabla \times (Tq) = \frac{\partial T}{\partial t} \quad (1.12)$$

где T – температура; t – время; ρ_w и c_w – плотность и теплоемкость флюида, соответственно; ρ и c – плотность и теплоемкость горной породы, соответственно; q – скорость фильтрации; k_e – коэффициент теплообмена между флюидом и породой.

Наблюдения за температурой воды могут быть использованы в самых различных случаях. Необходимо отметить, что теплота не является нейтральным мигрантом. При рассмотрении движения фронта теплового трасера теплообмен с породой замедляет его продвижение, аналогично процессам сорбции, замедляющим продвижение фронта сорбируемого мигранта [56]. Также необходимо учитывать, что большая разница температур между фоновой и закачиваемой водой, как и большая разница концентраций, может привести к искажению поля напоров и возникновению плотностной конвекции.

При постановке трасерного опробования нередко закачиваемый трасер имеет температуру, отличную от фоновой температуры воды, находящейся в водоносном горизонте. В этом случае в рамках одного и того же опыта возможно слежение за температурой воды в наблюдательных скважинах в дополнение к основному трасеру. Это позволяет повысить информативность опыта и точнее определить миграционные параметры. Также, вода с температурой, отличной от пластовой, может использоваться как самостоятельный трасер.

Резкие перепады температуры воды могут наблюдаться и в естественных условиях. В работе [60] рассматривается использование дистанционных методов тепловой съемки для определения участков разгрузки подземных вод.

При достаточно большой амплитуде годовых колебаний температуры дневной поверхности изменения температуры подземных вод оказываются достаточными для оценки расхода потока подземных вод [62].

При рассмотрении крупных объектов, таких как речные или даже артезианские бассейны, температурные поля могут служить для оценки областей и интенсивности питания и разгрузки подземных вод. Предполагается [56], что конвекционный перенос тепла с подземными водами вносит искажения в распределение температуры геологической среды. Отклонения от нормального температурного градиента рассматриваются как аномалии, обусловленные региональными потоками подземных вод.

1.3.5. Возраст подземных вод

Частным, но заслуживающим отдельного рассмотрения случаем использования концентраций растворенных веществ является использование калибровки моделей с использованием возраста подземных вод [129]. Под «возрастом» воды подразумевается время нахождения отдельно взятой частицы воды в подземных водах. Возраст начинает отсчитываться с момента поступления отдельной частицы в подземные воды, например, с инфильтрационным питанием. Первые работы, посвященные возможным способам определения возраста подземных вод и применения его на практике, появились еще в 1970-х годах [138, 142].

Преимуществом этого метода является то, что используется природный трасер. Для трасерных испытаний, поставленных с целью определения миграционных параметров, основной проблемой является охват достаточно большой области подземных вод. Для достоверной оценки миграционных параметров водоносного горизонта применительно, например, к миграции загрязнений, желательно использовать опытный участок размером в сотни метров. С другой стороны, выполнение трасерного опыта такого масштаба требует очень больших затрат времени и на практике не реализуется. При использовании возраста подземных вод эта проблема снимается, так как возраст подземных вод характеризует водоносный горизонт в целом, а не отдельные его участки.

В основе определения возраста воды лежит изотопный анализ. Возраст воды определяется либо по концентрации одного изотопа, либо по соотношению концентраций двух изотопов. Примеры используемых для определения возраста воды изотопов: пара тритий-гелий [117] углерод-14 [104], хлор-36 [119] и другие. Изотоп ^{36}Cl образуется в атмосфере, и с атмосферными осадками попадает в подземные воды, где его концентрация снижается за счет радиоактивного распада. Тритий используется в паре с гелием ^3He , который является продуктом распада трития и не появляется в других процессах радиоактивного распада. В атмосферной воде концентрация ^3He находится в равновесии с атмосферой. Для подземных вод предполагается, что гелий-3 мигрирует совместно с тритием, из которого он образуется. На основании этого предположения возраст воды определяется по соотношению концентраций ^3H и ^3He .

Возраст воды можно моделировать напрямую, получая распределение возрастов на весь моделируемый объем подземных вод. Уравнение, описывающее распределение возраста подземных вод в стационарном потоке приведено по [91]:

$$\frac{\partial A}{\partial t} = 1 - \nabla \cdot A \frac{q}{n} + \nabla \cdot D \cdot \nabla A + \frac{F}{n\rho} \quad (1.13)$$

где A – возраст воды; q – скорость фильтрации; n – активная пористость; ρ – плотность воды; D – тензор гидродисперсии; F – темп увеличения концентрации вещества, позволяющего определить возраст воды. При этом F также может быть задан как темп увеличения непосредственно возраста воды. Учитывая, что движение подземных вод сравнительно медленное, и возраст может измеряться сотнями и даже тысячами лет, больше внимания уделяется учету дисперсии, которой иногда можно совершенно пренебречь при рассмотрении коротких искусственных опытов.

Несмотря на то, что изотопный анализ значительно сложнее и дороже традиционного химического анализа состава подземных вод, в настоящее время активно развивается использование возраста при калибровке моделей [116; 129]. О распространении этого метода

также говорит появление программных инструментов, специально предназначенных исключительно для обработки возраста подземных вод как природного трасера [103].

1.3.6. Совмещение различных наборов параметров

Конечно, используемые при калибровке моделей типы наблюдений не ограничиваются перечисленными. Имеющихся данных полевых исследований в подавляющем большинстве случаев недостаточно для достоверного детального описания геологической среды. Поэтому для верификации и калибровки моделей желательно использовать все доступные данные. В ряде случаев более эффективное использование уже имеющихся данных может быть полезнее, чем проведение дополнительных изысканий [86]. Выше перечислены самые распространенные типы. В большей части приведенных статей рассматривается использование одного типа данных, его плюсы и минусы. Частично это обусловлено тем, что для расчета полей напоров, концентраций и температур требуются разные математические модели. Эти математические модели обычно калибруются отдельно друг от друга, что увеличивает трудозатраты на проведение калибровки и снижает ее точность.

Работ, оценивающих эффективность совместного использования наблюдений различных типов, гораздо меньше. Чаще всего рассматривают совместное использование напоров подземных вод и расходов рек, а также напоров и концентраций растворенных веществ. Тема совместного использования различных типов наблюдений развивается уже больше 20 лет, есть положительные результаты, показывающие эффективность такого совмещения.

Статья R.M. Gailey с соавторами [86] — одна из первых, в которых предложено совместное использование наблюдений различных типов в рамках решения одной обратной задачи. В указанной статье рассмотрена свалка, являющаяся источником загрязнения подземных вод. Для оценки дальнейшего распространения загрязнения требовалось оценить как фильтрационные, так и миграционные параметры загрязняемого водоносного горизонта. В статье показано, что одних только уровней недостаточно для получения надежных значений параметров при отсутствии информации о расходе фильтрационного потока. Информация о концентрациях сама по себе позволила оценить расход фильтрационного потока и проводимость водоносного горизонта. При объединении в одной обратной задаче данных об уровнях и концентрациях значительно снизилась неопределенность откалиброванных значений параметров. После калибровки модели совместно по данным уровней и концентраций пределы 95% доверительного интервала прогнозных концентраций находятся в пределах 15% от средних концентраций. При калибровке модели отдельно по замерам уровней или концентраций пределы 95% доверительного интервала прогнозных концентраций настолько велики, что авторы назвали модель «непригодной для прогнозирования миграции».

В статье Brian Wagner [140] рассматривается теоретический пример. Замеры уровней подземных вод и концентраций загрязнения позволили одновременно оценить параметры как водоносного горизонта, так и источника загрязнения. В работе Evan Anderman и Mary Hill [55] на теоретическом примере подтверждается, что совместное использование при калибровке данных об уровнях и концентрациях позволяет получить более оптимальные значения параметров, чем последовательная калибровка. Однако, даже спустя 20 лет, прошедших после выхода статьи [86] авторы современных работ [110; 112] обращают внимание, что нормой все еще является раздельное использование данных различных типов. Их совмещению посвящено очень мало работ, особенно по сравнению с многочисленными статьями, посвященными калибровке геофильтрационных параметров по уровням подземных вод. Совместное использование различных типов наблюдений на настоящий момент остается перспективным, но слабо разработанным приемом при решении обратных задач в гидрогеологии.

1.4. Выводы по главе 1

В результате проведенного обзора современного состояния проблемы калибровки моделей гидрогеологических процессов можно сделать следующие выводы:

1. Решение обратной задачи является важным этапом работы над моделями подземных вод. Сегодня основным методом решения обратных задач при обосновании гидрогеологических моделей является семейство не прямых методов, носящих общее название калибровка моделей. Обычно требуется уточнение начальных значений модельных параметров, которое проводится путем ручной или автоматической калибровки. В настоящее время ручная и автоматическая калибровка используются наравне и применяются в различных случаях.

2. Ручная калибровка чаще применяется для простых геофильтрационных схем с небольшим количеством параметров, автоматическая применяется в более сложных случаях. При этом автоматическая калибровка не является самодостаточной [111]. При неверно проведенной геофильтрационной схематизации полностью автоматическая калибровка может не привести к желаемому результату. Либо расхождение между модельными и наблюдаемыми величинами не удастся снизить до желаемой величины, либо полученное при калибровке сочетание параметров будет противоречить здравому смыслу. В любом случае потребуются экспертная оценка проблемы со стороны специалиста-гидрогеолога. В настоящее время калибровка моделей является инструментом, помогающим углубить понимание изучаемого объекта и получить эффективные значения необходимых параметров. Ввиду того, что количество информации об объекте всегда ограничено, никакие из методов калибровки принципиально не могут достоверно выявить и обосновать особенности геологического

строения и пространственной неоднородности параметров. Достижимым на практике является только выявление более вероятных схем геологической среды из всех возможных.

3. Из прочих методов решения обратных задач используются узкоспециализированные методы, связанные с интерпретацией специально поставленных опытных работ (наблюдений). Например, обработка опытных откачек (наливов) графоаналитическими методами. Тем не менее, в современных программных пакетах, разработанных для обработки ОФР реализована возможность применения автоматической калибровки моделей, используемая для сложных случаев. В качестве примеров можно привести пакеты ANSDIMAT [40] и AQTESOLV [75]. Таким образом, в настоящее время калибровка математических моделей начинает применяться даже в тех областях прикладной гидрогеологии, для которых имеется длительный успешный опыт применения более простых методов.

4. Для калибровки моделей могут быть использованы различные типы данных. В большинстве случаев рассматриваются особенности применения каждого из типов наблюдений отдельно. Однако в литературе существуют свидетельства о перспективности совмещения различных типов наблюдений в едином процессе калибровки нескольких моделей. Поэтому для дальнейших исследований примем рабочую гипотезу о том, что совместный анализ разнородных данных наблюдений в процессе калибровки позволяет более результативно калибровать геофильтрационные и геомиграционные модели. Таким образом, можно сформулировать следующие задачи, решаемые в настоящей работе, направленные на поиск доказательств справедливости этой гипотезы с использованием моделей синтетических и реальных гидрогеологических объектов:

- Типизация подходов к совместной калибровке применительно к моделям эксплуатации и загрязнения подземных вод;
- Разработка и верификация на тестовых примерах методики совместной калибровки различных моделей с использованием существующих инструментов автоматической калибровки;
- Применение совместной калибровки разномасштабных геофильтрационных моделей на участках оценки и переоценки запасов подземных вод;
- Использование совместной калибровки геофильтрации и геомиграции на объектах загрязнения подземных вод;
- Анализ преимуществ и ограничений метода совместной калибровки моделей по сравнению с традиционными методами.

Глава 2. Методика полуавтоматической калибровки моделей гидрогеологических объектов

Как показано в главе 1, калибровка модели является одним из важных этапов разработки моделей гидрогеологических процессов. Целью данной главы является разработка методики совместной калибровки использованием существующих инструментов автоматической калибровки.

Для достижения этой цели в главе рассматриваются принципы выполнения и определение условий применения калибровки в модельных гидрогеологических исследованиях и проводится типизация подходов к совместной калибровке моделей гидрогеологических процессов.

Следует отметить, что в русскоязычной гидрогеологической литературе методика проведения калибровки моделей практически не рассматривается. Типичной является цитата из статьи [4] «Модель калибровалась по результатам решения, помимо стационарной, двух нестационарных задач, воспроизводивших результаты масштабных групповых откачек, проведенных в 1981 и 1982 гг.». Другой информации о выполненной калибровке не приведено. В этой и других статьях (например, [18]) кратко констатируется факт выполнения калибровки модели без какого-либо рассмотрения ее методики. По этой причине ниже перечислены основные этапы калибровки выведенные на основе анализа опубликованных зарубежных руководств [74; 99] и многочисленных исследовательских статей по методике калибровки геофильтрационных и геомиграционных моделей.

Полагая, что геофильтрационная и вычислительная схематизация и первичная разработка модели уже завершены, будем рассматривать этап калибровки состоящий из следующих шагов:

- Сбор фактических данных наблюдений и назначение весовых коэффициентов;
- Анализ чувствительности результатов моделирования к изменению модельных параметров;
- Выбор калибруемых параметров с учетом неопределенности исходных данных и результатов анализа чувствительности;
- Выбор настроек при автоматической калибровке, таких как: критерии остановки, начальные значения параметров, границы интервалов поиска значений, допустимые изменения за одну итерацию;
- Собственно калибровка, включающая в себя подбор значений выбранных параметров;
- Верификация модели. Если результаты моделирования признаны удовлетворительными, завершение калибровки. Если модель воспроизводит известные природные условия с неудовлетворительной точностью (модель не прошла верификацию), то требуется продолжить работу над моделью с более раннего этапа. Глубина изменений зависит от конкретной ситуации. Может быть достаточно изменения настроек калибровки и весовых

коэффициентов используемых наблюдений (такой пример рассмотрен в главе 5). Или может потребоваться переработка модели вплоть до пересмотра геофильтрационной схемы (такой пример рассмотрен в главе 4).

Перечисленные этапы подробнее рассмотрены в разделе 2.4. Здесь необходимо оговорить использование термина «калибрация». С одной стороны, калибрация обозначает этап разработки модели, включающий и подготовку исходных данных, и верификацию модели. Калибрация завершается тогда, когда специалист, занимающийся разработкой модели, проведя верификацию модели принимает решение, что разработанная модель воспроизводит рассматриваемые процессы с приемлемой точностью. После завершения этапа калибрации модель используется для решения исходно поставленной задачи.

С другой стороны, «калибрацией» называется непосредственно технический процесс подбора параметров, либо вручную, либо с помощью какой-либо вспомогательной программы, позволяющей автоматически искать минимум некой целевой функции качества. Такой метод далее будем называть полуавтоматической калибровкой, так как он может содержать многократные попытки автоматической калибровки. Каждая попытка калибровки – это однократный запуск соответствующей вспомогательной программы, которая запускает модель некоторое количество раз, возможно десятки и сотни. Завершается попытка калибровки с завершением работы этой вспомогательной программы. Подробнее критерии завершения попытки калибровки описаны в разделе 2.4.3. На этапе калибровки может быть предпринято много отдельных попыток автоматической калибровки. В примере, рассмотренном в разделе 5.2, этап калибровки включал в себя более десяти отдельных попыток калибровки.

Здесь и далее калибровка как этап разработки модели называется «этап калибровки». Просто «калибровка» обозначает непосредственно процесс подбора параметров.

В настоящей работе далее используются методы полуавтоматической калибровки, основанные на применении уже существующих программных кодов для калибровки геофильтрационных и геомиграционных моделей. Эти коды позволяют в автоматическом режиме искать минимум некой целевой функции, показывающей сходство модельных и наблюдаемых характеристик изучаемого процесса (поля напоров, расходов разгрузки, концентраций, температур и т.д.). Но поскольку этап калибровки включает целый ряд шагов, перечисленных выше, выполняемых не в автоматическом режиме, то, как уже отмечено выше, далее методику будем называть полуавтоматической. Это название подчёркивает тот факт, что калибровка далеко не сводится только к автоматическому поиску минимума целевой функции.

Все описанные в данной работе модельные эксперименты проводились с помощью широко используемых в гидрогеологии программ. Для решения прямых фильтрационных задач использовалась программа Modflow [96], миграционных – MT3DMS [146]. Для решения

обратных задач использовались программы PEST [73] и UCODE [120]. Для работы с указанными программами использовалась оболочка Processing Modflow [65]. Рассматриваемая в этой главе существующая методика калибрации моделей и ее авторская модификация, реализована с использованием именно этих программ.

2.1. Целевая функция

Программы PEST и UCODE при подборе параметров используют метод наименьших квадратов. Критерием расхождения результатов моделирования и натурных замеров является сумма квадратов отклонений, называемая в соответствующей литературе [74, 99] «целевой функцией» (objective function). Целевая функция может быть представлена как [99]:

$$S(b) = \sum_{i=1}^{ND} \omega_i [y_i - y'_i(b)]^2 = \sum_{i=1}^{ND} \omega_i e_i^2 \quad (2.1)$$

где ND – количество наблюдений; y_i – i -тое наблюдение; $y'_i(b)$ – соответствующая этому наблюдению модельная величина, являющаяся функцией параметров модели b ; ω_i – вес i -того слагаемого целевой функции, e_i – i -тое отклонение (невязка), равное разнице между рассчитанным и фактическим значением. Чем лучше модель воспроизводит наблюдения, тем меньше целевая функция. В идеальном случае, когда модель точно воспроизводит наблюдаемые величины, значение данной целевой функции равно нулю.

Для объединения разнородных измерений целевая функция незначительно модифицируется и представляется как сумма взвешенных квадратов отклонений каждого из типов наблюдений:

$$S(\mathbf{b}) = \sum_{j=1}^{NG} \sum_{i=1}^{ND_j} \omega_{ij} [y_{ij} - y'_{ij}(\mathbf{b})]^2 \quad (2.2)$$

где NG – количество наборов (групп) измерений.

Особо следует рассмотреть выбор весовых коэффициентов для наблюдений. Главное предположение состоит в следующем [99]. Если модель правильно воспроизводит рассматриваемый процесс, то отклонения наблюдаемых величин от модельных носят случайный характер и связаны с ошибками разного рода. Также предполагается, что распределение этих случайных ошибок должно соответствовать нормальному закону с нулевым математическим ожиданием. Величина этих случайных ошибок характеризуется стандартным отклонением.

Весовой коэффициент должен выполнять две функции [99]. Во-первых, весовые коэффициенты должны обеспечить приведение всех невязок к единой размерности, чтобы использование целевой функции (2.2) было допустимо. Во-вторых, весовые коэффициенты должны снизить влияние менее точных замеров относительно более точных. Как указано выше,

характеристикой точности замера может являться стандартная ошибка (отклонение) или, поскольку в целевой функции используются квадраты невязок, дисперсия. Отсюда очевидным представляется использование весовых коэффициентов, обратно пропорциональных дисперсии замеров. Использование таких весовых коэффициентов предлагается во всех работах, посвященных решению обратных задач безотносительно сферы применения, например [59]. В этом случае целевая функция преобразуется к виду

$$S(\mathbf{b}) = \sum_{j=1}^{NG} \sum_{i=1}^{ND_j} \frac{[y_{ij} - y'_{ij}(\mathbf{b})]^2}{\sigma_{ij}^2} \text{ при } \omega_{ij} = \frac{1}{\sigma_{ij}^2} \quad (2.3)$$

где σ_{ij}^2 – дисперсия i -того замера в j -той группе наблюдений.

В большинстве случаев в пределах одной группы наблюдения проведены с одинаковой точностью, и можно считать, что дисперсия всех наблюдений в пределах группы одинакова. Например, можно принять, что при проведении опытной откачки все уровни измерены со стандартной ошибкой 0.01 м и, следовательно, дисперсия для всех замеров уровней одинакова и равна 10^{-4} м². В этом случае нет необходимости выделять отдельные весовые коэффициенты для каждого наблюдения и назначить единый коэффициент ω_j . В других случаях, в пределах одной группы стандартная ошибка замеров может различаться. Например, при измерении общей минерализации с помощью кондуктометра ошибка составляет некоторую долю от текущего значения. Соответственно, стандартное отклонение будет зависеть от самого значения минерализации, и разным наблюдениям в пределах одной группы необходимо назначать индивидуальные весовые коэффициенты.

Дисперсия зависит не только от инструментальной точности измерений. Например, точность определения абсолютной отметки уровня подземных вод зависит, как от точности измерения глубины положения уровня от устья скважины, так и от точности высотной привязки устья этой скважины. Другим примером является использование разновременных замеров при калибровке стационарной модели. Обыкновенно стационарные модели описывают некоторое среднесуточное состояние подземных вод [50]. Наблюдения отклоняются от среднесуточных значений за счет внутригодовой изменчивости, которая может быть существенно больше инструментальной погрешности измерений. Общая дисперсия каждого замера σ^2 складывается из дисперсий каждого из факторов. Для приведенного примера:

$$\sigma^2 = \sigma_{и}^2 + \sigma_{п}^2 + \sigma_{г}^2 + \sigma_{мг}^2 \quad (2.4)$$

где $\sigma_{и}$ – инструментальная ошибка замера; $\sigma_{п}$ – ошибка высотной привязки; $\sigma_{г}$ – стандартное отклонение уровня за счет внутригодовых колебаний.

В некоторых случаях достоверно определить ошибку замера невозможно. Это может быть связано, с неполной документацией, например, наличие данных о концентрации исследуемых компонентов с отсутствием информации об использованных методах химического анализа и,

соответственно, их точности. Могут возникнуть сомнения в достоверности данных наблюдений. В этом случае «ненадежные» данные можно отбраковать и исключить из калибровки, или использовать, но отразить (возможно) меньшую достоверность сниженным весовым коэффициентом. Для учета «поправки на достоверность» введем набор безразмерных коэффициентов α_j такой, что $\sum_{j=1}^{NG} \alpha_j = 1$. Как указано выше, NG обозначает количество групп наблюдений. Для учета наблюдений с различной достоверностью предлагается выделять в отдельные группы наблюдения не только разных типов, но и полученные из разных источников. Например, замеры уровней, выполненные своими силами и сторонними организациями.

По сути, коэффициент α определяет долю каждой группы наблюдений в целевой функции. Главной проблемой является то, что строго обосновать оптимальную долю каждой группы наблюдений невозможно. В качестве базового варианта предлагается предпосылка о равенстве доли каждой из групп наблюдений в целевой функции, то есть $\alpha_1 = \dots = \alpha_n = 1/n$ д.е. При необходимости изменения соотношения долей различных групп наблюдений конкретные значения коэффициентов α_j выбираются специалистом, выполняющим калибровку, на основании некоторой априорной информации и/или выбираются из нескольких вариантов (подбираются), как рассмотрено в главе 5.

Предпосылка о равенстве долей каждой группы наблюдений также требует введения поправки на количество замеров. Количество замеров в разных группах может существенно различаться. В примере, рассмотренном в главе 4, выделено три группы наблюдений (Таблица 4.4) – результаты двух опытных откачек и данные режимных наблюдений за уровнями. Количество замеров по группам составило 1091, 270 и 18. Предпосылка равенства долей означает, что при калибровке модели 18 значений стационарных уровней в режимных скважинах имеют такую же «важность» для оценки правильности модели как 1091 значение понижений в наблюдательных скважинах за время опытной откачке.

Поскольку используемая целевая функция представляет собой сумму, то ее величина, очевидным образом, зависит от количества слагаемых. Для обеспечения равенства долей групп наблюдений в целевой функции предлагается поправка на количество замеров вида $\sum_{j=1}^{NG} M_j / M_j$, где M_j – количество замеров в j -той группе наблюдений. Таким образом, чем меньше замеров в некоторой группе, тем больше будет вес каждого отдельного замера.

С учетом предлагаемых поправок обобщенная формула для вычисления весовых коэффициентов, входящих в (2.2) принимает следующий вид:

$$\omega_{i,j} = \alpha_j \frac{\sum_{j=1}^N M_j}{M_j \sigma_j^2} \quad (2.5)$$

где α_j – доля j -того набора данных в суммарной дисперсии; M_j – количество наблюдений в j -том наборе данных. σ_j^2 – дисперсия наблюдений в j -том наборе данных. Необходимо отметить, что формула (2.5) необходима для корректного расчета весовых коэффициентов при использовании нескольких групп наблюдений. При использовании только одной группы наблюдений вполне допускается отсутствие весовых коэффициентов, а точнее, приравнивание всех коэффициентов ω_i в формуле (2.1) единице [73].

2.2. Оценка чувствительности модели к изменению параметров

Наблюдения обеспечивают информацию о неоднородности параметров, а также о величинах параметров. Это утверждение можно подкрепить несколькими примерами:

- Распределение уровней подземных вод показывает плавное изменение градиента. При известной геологической истории объекта можно предположить, что проницаемость пород также изменяется плавно.
- Распределение уровней подземных вод показывает несколько участков резкого изменения градиента. В естественных условиях можно предположить, что есть отдельные участки с различной проницаемостью, что можно отразить на модели в виде ряда зон.
- Наблюдения за концентрациями загрязнения показывают снижение концентрации со временем. Это свидетельствует о распаде загрязнителя со временем.

При калибровке основные усилия направлены на использование наблюдений для подбора значений параметров. При этом разные наблюдения могут иметь различную ценность при калибровке параметров. Для оценки этого используется анализ чувствительности. Сам по себе анализ чувствительности – обширная область. Существует много методов, рассмотрим анализ на основе модельно-независимой статистики, используемой в PEST и UCODE. Этот метод анализа чувствительности хорошо работает, если зависимость изменения модельной величины от изменения параметра можно принять линейной. С другой стороны, чтобы этот метод вообще перестал быть полезен, эта зависимость должна быть чрезвычайно нелинейной.

Чувствительности рассчитываются как производная модельных величин по отношению к параметрам модели:

$$\left(\frac{\partial y'_i}{\partial b_j} \right)_b \quad (2.6)$$

где y'_i – модельная величина, соответствующая i -тому наблюдению, b_j – j -тый параметр и индекс b показывает, что чувствительности вычислены для параметров, составляющих вектор b . Последнее важно, поскольку чувствительности будут различны для различных значений параметров.

Часть программ для моделирования, такие как MODFLOW-2000, вычисляют производные, используя уравнения чувствительности. Другие программы приближенно вычисляют чувствительности используя прямую, обратную или центральную разницу. Приближенно производная записывается через прямую разницу в виде:

$$\left(\frac{\partial y_i'}{\partial b_j} \right)_b \approx \left(\frac{y_i'(b + \Delta b) - y_i'(b)}{\Delta b_j} \right) \quad (2.7)$$

где Δb – вектор, в котором все члены, кроме одного, нулевые, и j -тый член равен Δb_j . Чувствительность вычисляется после двух запусков модели – один запуск с использованием параметра b , другой запуск с использованием параметра $(b + \Delta b)$. Чувствительности параметров вычисляются отдельно. При этом необходимо отметить, что во многих случаях при калибровке подбираются логарифмы значений параметров, и чувствительности так же рассчитываются для логарифмов значений. Использование логарифмов позволяет заведомо избежать присвоения модельному параметру нулевого или отрицательного значения. Вычисление чувствительности модели к изменению логарифма параметра позволяет более корректно вычислять ее на всем диапазоне изменения параметра. В руководствах к программам PEST [73] и UCODE [120] прямо рекомендуется использовать логарифмическое преобразование, с комментарием что использование собственных значений параметров при калибровке может привести к невозможность откалибровать модель.

В качестве примера рассмотрим простую модель опытной откачки из скважины вблизи реки на расстоянии L . Водоносный горизонт напорный, однородный, река прямая и гидродинамически широкая. Для такой схемы влияние реки эффективно учитывается с помощью метода зеркальных отображений. Приток воды из реки учитывается заданием фиктивной наблюдательной скважины, представляющей собой зеркальное отображение действующей скважины относительно линии берега реки. Сопротивление донных отложений для широкой реки учитывается с помощью расчетного приема сдвига берега реки на величину ΔL . При стационарном режиме фильтрации понижение уровня на стенке скважины за счет откачки определяется как [50]:

$$S = \frac{Q}{2\pi T} \ln \frac{r'}{r_c} \quad (2.8)$$

где r' - расстояние от действующей скважины до фиктивной. Примем следующие параметры задачи: дебит откачки составляет $Q = 100 \text{ м}^3/\text{сут}$; проводимость $T = 100 \text{ м}^2/\text{сут}$; радиус скважины $r_c = 0.1 \text{ м}$; расстояние от скважины до реки $L = 50 \text{ м}$; мощность донных отложений $m_0 = 1 \text{ м}$. Рассмотрим зависимость понижения на стенке скважины от коэффициента фильтрации донных отложений k_0 .

Расчетная величина сдвига линии берега определяется как $\Delta L = \sqrt{T \frac{m_0}{k_0}}$ [50].

Если пренебречь радиусом скважины, то расстояние от расчетной точки до фиктивной скважины составит $r' = 2L + 2\Delta L$. При $k_0 = 1$ м/сут и указанных значениях остальных параметров величина ΔL составит 9.9 м, а понижение $S = 1.13$ м. Некоторые пары значений k_0 и S для наглядности представлены в таблице 2.1. На рисунке 2.1 представлена зависимость понижения от k_0 в диапазоне от 1×10^{-8} до 1×10^2 м/сут. Соседние значения k_0 отличаются в два раза. На рисунке 2.1 видно, что при значениях ниже 0.01 м/сут одно и то же относительное изменение k_0 приводит к примерно одинаковому изменению понижения. При значениях k_0 выше 1 м/сут изменение понижения при таком же пропорциональном изменении k_0 гораздо ниже.

Другими словами, чувствительность модели к изменению коэффициента фильтрации донных отложений при значениях выше 0.1 м/сут снижается. При значениях ниже 0.01 м/сут чувствительность модели к изменению k_0 практически постоянна. И в целом, чувствительность модели к изменению параметра зависит от значения самого параметра, что необходимо учитывать при задании начальных условий для калибровки модели.

Таблица 2.1 Зависимость понижения на стенке скважины от коэффициента фильтрации донных отложений (k_0).

Коэффициент фильтрации донных отложений k_0 , м/сут	Величина понижения S , м	Разница понижений, м
4	1.115	0.006
2	1.120	
1	1.128	0.008
0.5	1.139	0.011
0.25	1.153	0.014
...		
4×10^{-5}	1.654	0.054
2×10^{-5}	1.708	
1×10^{-5}	1.762	0.054
5×10^{-6}	1.816	0.055
2.5×10^{-6}	1.871	

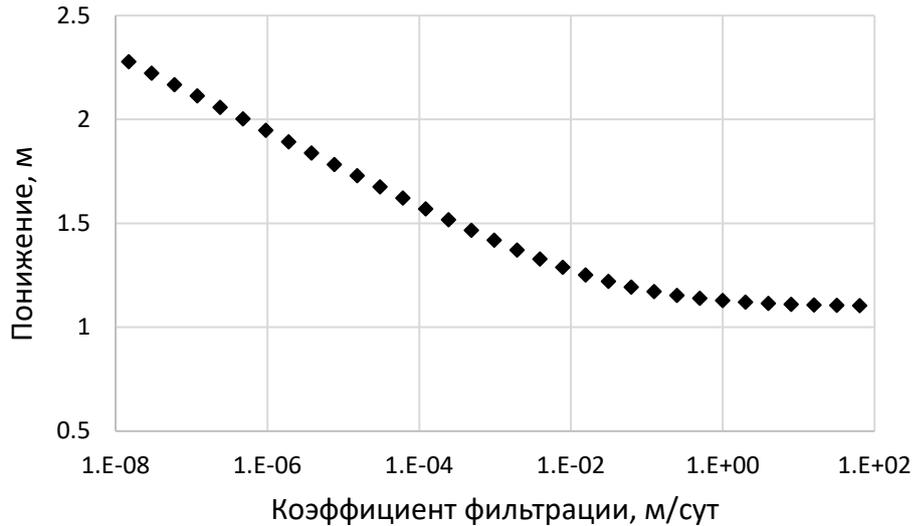


Рисунок. 2.1. Зависимость расчетного понижения на стенке скважины от коэффициента фильтрации донных отложений (k_0).

Чувствительности могут быть использованы для оценки «важности» наблюдений для процесса калибровки. Фактические значения важны, если их модельные аналоги сильно изменяются при небольших изменениях параметров. Наоборот, наблюдения не очень важны если их модельные аналоги мало изменяются при больших изменениях параметров. Обычно, необходимо сравнивать относительную важность различных наблюдений. Проблема заключается в том, что размерность чувствительности зависит от модельных аналогов наблюдаемых величин и от изменяемых параметров. Таким образом, размерность чувствительности для разных типов наблюдений и параметров будет варьироваться. Эта проблема решается вычислением безразмерной нормированной чувствительности dss (Dimensionless Scaled Sensitivity), что реализовано во многих используемых для моделирования и калибровки моделей программах. В Modflow-2000 и UCODE [120] используется уравнение

$$dss_{ij} = \left(\frac{\partial y'_i}{\partial (\ln b_j)} \right) \Big|_b \left| \ln b_j \right| \omega_i^{1/2} = \left[\left(\frac{\partial y'_i}{\partial b_j} \right) \Big|_b b_j \right] \left| \ln b_j \right| \omega_i^{1/2} \quad (2.9)$$

где y'_i – модельная величина, соответствующая i -тому наблюдению, однако могут использоваться другие величины, такие как потенциальные наблюдения; b_j – j -тый параметр; $\left(\frac{\partial y'_i}{\partial b_j} \right)$ – производная, вычисленная для набора параметров, содержащихся в векторе b ; ω_i – вес i -того наблюдения.

Логарифмическое преобразование при подборе параметров используется для ускорения процесса и получения лучших результатов, поскольку некоторые параметры могут изменяться в пределах нескольких порядков.

Безразмерная нормированная чувствительность может быть использована двумя способами. Первый способ – она может быть использована для сравнения влияния различных наблюдений для калибровки одного параметра. Наблюдения с большой dss обеспечивают более полную информацию о величине параметра, чем наблюдения с малой dss . Второй способ – безразмерная нормированная чувствительность может быть использована для сравнения влияния различных параметров на значение отдельно взятой модельной величины. Более важные параметры имеют большее значение dss .

На основе безразмерной нормированной чувствительности dss рассчитывается обобщенная нормированная чувствительность css (Composite Scaled Sensitivity), которая является численной характеристикой чувствительности результатов моделирования в целом к отдельному параметру [120]:

$$css = \sqrt{\sum_{i=1}^M dss_i^2 / M} \quad (2.10)$$

где M – общее количество наблюдений.

Поскольку величина обобщенной чувствительности – это преобразованная сумма величин чувствительностей для каждого отдельного замера, то в нее можно формально включить любое доступное количество данных независимо от источника или опыта, из которых они получены. Абсолютные величины чувствительности css не информативны [99], поскольку они зависят от количества используемых наблюдений и заданных весовых коэффициентов. Более полезным является представление значений чувствительности в относительных величинах, принимая максимальное значение чувствительности за условную единицу.

2.3. Использование регуляризации при калибровке моделей

Как упоминалось выше, все обратные задачи в гидрогеологии относятся к классу некорректных. Возможных сочетаний значений параметров для любой модели существует бесконечное количество, и не существует единственного верного решения. В ряде случаев для определения оптимального сочетания параметров необходимо использовать регуляризацию.

В различных источниках приводятся различные определения регуляризации. У пионеров этого метода – Тихонова и Арсенина [43] в качестве определения приводится развернутое описание метода регуляризации. В книге «Regularization of inverse problems» [79] регуляризация определяется как приближение некорректной задачи семейством близких к ней корректных. John Doherty в своей книге, посвященной калибровке [74], определяет регуляризацию в широком смысле как набор методов устранения проблемы неединственности решения. В данной работе принято определение John Doherty. Ниже рассмотрены распространенные варианты регуляризации.

2.3.1. Ручная регуляризация

Самый первый вариант – ручная регуляризация, у Тихонова и Арсенина названа «регуляризацией по здравому смыслу». Она заключается в сужении области поиска решения на этапе постановки задачи. К ручной регуляризации можно отнести ограничение минимально и максимально допустимых значений каждого из калибруемых параметров. Эти пределы должны соответствовать физическому смыслу конкретного параметра и определяются экспертно.

Если в процессе калибрации какой-либо параметр достигает заранее заданной границы значений, это может происходить по нескольким причинам:

- Допустимые пределы изменения параметра выбраны слишком жестко;
- Наоборот, допустимые пределы изменения параметра выбраны слишком широко;
- Параметрам, исключенным из процесса калибрации, назначены неверные значения;
- Проведена неверная схематизация естественных условий;
- Существуют ошибки в используемых наблюдениях. Не проведена, или проведена недостаточно строго фильтрация имеющихся данных.

Таким образом, кроме непосредственно регуляризации, задание допустимых границ изменения параметров может помочь выявить ошибки, допущенные при разработке модели.

Для регуляризации решения обратной задачи также служит уменьшение количества калибруемых параметров. Из всего списка параметров модели экспертно и с помощью анализа чувствительности выбираются только те параметры, значения которых уточнить важнее всего, прочие параметры остаются неизменными. В процессе работы над моделью может оказаться необходимым прибегнуть к упрощению геофильтрационной схемы. При невозможности достоверно откалибровать параметры неоднородного водоносного горизонта можно задать его однородным. В этом случае может оказаться возможным подобрать единое значение, например проводимости, которое характеризует водоносный горизонт в целом, но характер неоднородности останется неизвестным.

Кроме того, уменьшение количества калибруемых параметров возможно за счет «связывания» параметров друг с другом. Из связанных параметров калибруется только один, значения остальных задаются фиксированным соотношением.

Пример: в песчаном разрезе выделено две разности песка, различающиеся по гранулометрическому составу. Можно коэффициенты фильтрации этих двух разностей калибровать независимо как два параметра. Для упрощения калибрации можно подбирать только один параметр, зафиксировав (допустим, по известному гранулометрическому составу), что коэффициент фильтрации более крупнозернистого песка ровно в 2.5 раза выше, чем у более

мелкозернистого. При этом сужается область поиска возможных сочетаний параметров, но необходимо каким-либо образом определять соотношения между значениями параметров.

2.3.2. Математическая регуляризация

Для калибровки моделей подземных вод чаще всего применяется два метода математической регуляризации [74]: сингулярное разложение и регуляризация по Тихонову. Подробное описание этих методов с точки зрения теории обратных задач выходит за рамки данной работы, и ниже приводится краткое их описание.

Сингулярное разложение (в англоязычной литературе *singular value decomposition* или SVD) – широко применяемая операция разложения матриц. Подробное описание приведено, например, в работах [41] и [74]. Применение метода SVD для регуляризации в общем виде приведено, например, в работе [95].

Применительно к моделям подземных вод SVD используется следующим образом [139]. Пусть в модели задано n параметров, и для калибровки используется m наблюдений. Чувствительности dss каждого наблюдения к каждому из параметров образуют матрицу размером $m \times n$. Сингулярное разложение этой матрицы позволяет выделить параметры, которые невозможно достоверно откалибровать по существующим наблюдениям. Эти параметры объединяются в так называемые «супер-параметры», когда нескольким модельным параметрам ставится в соответствие один калибруемый параметр, связанный с каждым параметром в группе известным соотношением. Ввиду высокой вычислительной сложности сингулярное разложение матрицы производится исключительно на компьютере. Алгоритм выделения супер-параметров на основе SVD реализован, например, в программе PEST [73]. Эта процедура аналогична «связыванию» параметров друг с другом при ручной регуляризации.

Ключевым различием здесь являются основания для объединения параметров. При ручной калибровке параметры объединяются согласно решению (экспертному мнению) разработчика модели. Супер-параметры на основе SVD выделяются автоматически, следуя формальному алгоритму на основании рассчитанных значений чувствительности. Таким образом, автоматическое объединение параметров целиком зависит от имеющихся наблюдений о состоянии реального объекта, исключая человеческий фактор. Кроме того, использование автоматического объединения параметров позволяет разрабатывать высокопараметризованные модели (с большим количеством параметров) для более эффективного использования всех имеющихся наблюдений [101].

Еще одним часто применяемым методом регуляризации является регуляризация по Тихонову. Название отражает вклад А.Н. Тихонова, предложившего и обосновавшего этот метод [43] в 70-х годах XX века. Суть регуляризации по Тихонову заключается в добавлении к

наблюдениям, типы которых рассмотрены выше, информации о самих параметрах. Это могут быть значения параметров, полученные полевыми или лабораторными методами. Кроме того, это может быть информация о пространственном распределении параметров.

Прямые определения значений параметров по отношению к процессу калибровки являются априорными. В зарубежной литературе они и носят название “prior information” или “prior estimate” [99], и может быть включена в целевую функцию наравне с наблюдениями:

$$S(\mathbf{b}) = \sum_{j=1}^{N_G} \sum_{i=1}^{N_{Dj}} \omega_{ij} [y_{ij} - y'_{ij}(\mathbf{b})]^2 + \sum_{k=1}^{N_{PR}} \omega_{PRk} [y_{PRk} - y'_{PRk}(\mathbf{b})]^2 \quad (2.11)$$

где y_{PRk} – k -тая априорная величина параметра; $y'_{PRk}(\mathbf{b})$ – значение этого параметра модели в рассматриваемой итерации; ω_{PRk} – вес k -той априорной величины; N_G – количество групп наблюдений; N_{Dj} – количество замеров в j -той группе; N_{PR} – количество априорных величин. Здесь возникает противоречие. С одной стороны, есть значение некоторого параметра, определенное каким-либо способом. С другой стороны, значение этого параметра выбрано для калибровки, то есть оно неизвестно и его требуется подобрать.

Это противоречие разрешается тем, что значения параметров никогда не определяются с абсолютной точностью. Погрешность определения параметра зачастую неизвестна. Существуют и другие проблемы, связанные с переносом априорных значений параметров в модель. Погрешность определения параметра зачастую неизвестна. Существуют и другие проблемы, связанные с переносом априорных значений параметров в модель. Например, коэффициент фильтрации песка, полученный при лабораторных испытаниях образцов, не точно характеризует водоносный горизонт в целом из-за масштабного эффекта. Проводимость водоносного горизонта, полученная при обработке опытной кустовой откачки, определяется для участка между центральной скважиной и наблюдательными. При этом остается неизвестным, насколько далеко в плане можно распространить эти результаты. При отсутствии дополнительной информации часто водоносный горизонт принимают однородным. Проводимость на всем моделируемом участке задается по результатам обработки либо одной опытной откачки, либо задается проводимость, осредненная по нескольким проведенным откачкам. Очевидно, что такая упрощенная модель не соответствует действительности, и эффективное значение модельных параметров будет отличаться от априорного. Таким образом, даже при наличии прямых определений параметров при разработке модели может потребоваться уточнение этих параметров путем калибровки.

Кроме собственно значений параметров для регуляризации по Тихонову можно использовать любую другую дополнительные информацию, которую можно выразить в виде числа, зависящего от параметров и/или результатов моделирования [139]. Наглядным примером

является предположение, что в литологически однородном водоносном горизонте проводимость в плане должна изменяться плавно. Другим примером регуляризатора может быть использование известных статистических параметров пространственного распределения геофильтрационных свойств. Многие исследования [84; 124; 134] показывают, что пространственное распределение коэффициента фильтрации описывается логнормальным законом распределения. Для этого распределения можно оценить по результатам полевых работ дисперсию и математическое ожидание и включить эти значения в целевую функцию как априорную информацию.

Пример: рассмотрим предположение о плавном пространственном распределении проводимости песчаного водоносного горизонта. Формально его можно выразить в виде «показателя гладкости». На примере проводимости одномерного фильтрационного потока показатель гладкости можно вычислить как:

$$A = \sum_{i=1}^{NB-1} (\lg T_{i+1} - \lg T_i)^2 \quad (2.12)$$

где A – показатель гладкости; i – номер блока модели; NB – количество блоков в модели; $\ln T_i$ – значение логарифма проводимости в i -том блоке модели. В случае однородного водоносного горизонта $A = 0$. Целевая функция с использованием показателя гладкости будет выглядеть следующим образом:

$$S(b) = \sum_{j=1}^{NG} \sum_{i=1}^{ND_j} \omega_{ij} [y_{ij} - y'_{ij}(b)]^2 + \omega_A A \quad (2.13)$$

где ω_A – весовой коэффициент показателя гладкости.

При наличии в модели одного резкого изменения проводимости между двумя зонами показатель гладкости будет иметь большее значение, чем если проводимость изменяется постепенно от блока к блоку. Это можно продемонстрировать на следующем синтетическом примере.

Модель одномерного геофильтрационного потока состоит из 10 блоков. Известно, что в первом модельном блоке проводимость составляет 1 м²/сут, в последнем модельном блоке – 10 м²/сут. Сравним два варианта: линейное изменение проводимости в пределах модели и резкое изменение проводимости между 5 и 6 модельным блоком.

Одной из основных проблем применения регуляризации по Тихонову является выбор весовых коэффициентов для дополнительных составляющих целевой функции. В отличие от наблюдений весовые коэффициенты для априорных величин не могут быть определены по формуле (2.5). В руководствах по калибровке моделей обычно предлагаются только общие рекомендации по их выбору [74; 99].

Таблица 2.2. К расчету показателя гладкости.

Номер модельного блока	Линейное изменение проводимости		Резкое изменение проводимости	
	Значение проводимости, м ² /сут	Разница между соседними блоками, рассчитанная по формуле (2.12)	Значение проводимости, м ² /сут	Разница между соседними блоками, рассчитанная по формуле (2.12)
1	1	0.48	1	0.00
2	2	0.16	1	0.00
3	3	0.08	1	0.00
4	4	0.05	1	0.00
5	5	0.03	1	5.30
6	6	0.02	10	0.00
7	7	0.02	10	0.00
8	8	0.01	10	0.00
9	9	0.01	10	0.00
10	10	0.01	10	0.00
Суммарный показатель гладкости		0.88		5.30

Между наблюдениями и априорными значениями с точки зрения калибровки существует принципиальное различие. Откалиброванная модель должна воспроизводить известные наблюдения с минимально возможной невязкой. В то же время, параметры заведомо должны отличаться от своих априорных значений – иначе калибровка не имеет смысла. Таким образом, поскольку заведомо ожидается наличие невязки между откалиброванными и априорными значениями параметров, вклад регуляризующей составляющей в общую целевую функцию должен быть снижен относительно наблюдений.

Влияние весовых коэффициентов регуляризующей составляющей проявляется следующим образом. Если весовые коэффициенты слишком низкие, решение не регуляризовано и возможно получение некорректных значений параметров. Если весовые коэффициенты слишком высокие, откалиброванные значения остаются практически равны исходным, и модель плохо воспроизводит наблюдения. Требуется проверить несколько вариантов задания весовых коэффициентов регуляризующей составляющей, проведя калибровку одной модели несколько раз с различными настройками.

Регуляризация снижает неопределенность получаемого распределения проводимости, но в основе калибровки лежат наблюдения за напорами и концентрациями. Это можно выразить, подобрав весовые коэффициенты таким образом, чтобы вклад регуляризующих составляющих составлял небольшую долю (порядка 0.01-0.1) от общей величины целевой функции.

Рекомендуется проведение пробной калибрации для определения диапазона изменения значений регуляризирующих составляющих и соответственно, выбора весовых коэффициентов.

Для применения «нестандартной» априорной информации (такой как показатель гладкости) может потребоваться написание вспомогательной программы-постпроцессора. После запуска MODFLOW и MT3DMS эта программа считывает текущие матрицы параметров и вычисляет показатель гладкости для проводимости. Вычисленную величину постпроцессор записывает в текстовый файл, который указан в качестве еще одного файла результатов моделирования. Таким образом, показатель гладкости проводимости (очевидным образом, зависящий от распределения проводимости) включается в целевую функцию, которая, как сказано выше, используется для оценки «качества» калибрации модели.

2.4. Практический алгоритм проведения калибрации

В этом разделе разработка собственно математической модели не рассматривается. Предполагается, что уже проведена геофильтрационная (геомиграционная) схематизация. На основе выбранной схемы уже составлена математическая модель, и на ней могут быть проведены расчеты без возникновения критических ошибок. Основная идея автоматического этапа калибрации состоит в поиске минимума функции (2.1) или (2.2), который зависит только от значений калибруемых параметров.

2.4.1. Подготовка наблюдений

В первую очередь подготавливаются имеющиеся наблюдения. Из имеющейся базы данных выделяется интересующий временной интервал. Далее производится фильтрация имеющихся наблюдений и отбраковка ошибочных значений. При наличии многолетних режимных наблюдений имеющиеся замеры могут быть усреднены по месяцам и годам. Статистический анализ исходных данных в настоящей работе не рассматривается.

При наличии достаточного количества наблюдений рекомендуется разделить на две группы – данные для калибрации модели и данные для ее последующей верификации [123]. К сожалению, далеко не всегда при работе над моделью в распоряжении имеется достаточное количество данных для выделения отдельных групп наблюдений для верификации и калибрации. Зачастую, откалиброванная модель принимается пригодной для проведения прогнозных расчетов без дополнительной верификации.

Всем используемым наблюдениям назначаются весовые коэффициенты, как описано в разделе 2.1. Сформированный список наблюдений преобразуется к формату, требуемому используемыми программами согласно руководству пользователя к конкретной программе, и добавляется в базу данных, описывающую модель.

2.4.2. Выбор параметров

На этапе геофильтрационной схематизации уже должен быть составлен список используемых модельных параметров и их начальные значения. Калибровать надо только часть из них. Конкретные параметры, которые необходимо уточнить, зависят от решаемой задачи и определяются специалистом. С другой стороны, не всегда существует возможность откалибровать все необходимые параметры. Возможность калибровки конкретного параметра зависит от наличия замеров, модельные аналоги которых будут зависеть от рассматриваемого параметра. Например, невозможно откалибровать параметр водоотдачи по результатам опытной откачки, если в наблюдательных скважинах проведены только два замера уровня – в начале и в конце откачки.

В менее очевидных случаях требуется проведение анализа чувствительности параметров. Как описано в разделе 2.2, высокая чувствительность наблюдений к некоторому параметру означает большое изменение моделируемых величин от малого изменения данного параметра. За счет этого есть возможность подобрать значение данного параметра с высокой точностью. Соответственно, параметры, к которым чувствительность наблюдений низкая, можно подобрать с низкой точностью. Поэтому может быть принято решение исключить параметр из процесса калибрации ввиду невозможности получить его значение с большей точностью, чем точность обоснованного начального значения.

Необходимо отметить, что «высокая» и «низкая» чувствительность – это относительные оценки. Абсолютная величина значения чувствительности мало информативна, поскольку зависит от количества замеров, типов наблюдений, диапазона изменения величин. Абсолютные значения чувствительности нельзя сравнивать для разных моделей. Поэтому невозможно дать рекомендации, какую величину чувствительности считать «высокой», а какую – «низкой». Имеет смысл сравнивать чувствительность одной модели к различным входным параметрам. Исходя из практического опыта [99] рекомендуется исключать из калибрации параметры, чувствительность к которым на 2-3 порядка меньше максимальной среди всех рассматриваемых параметров.

Выбор параметров, наблюдений и порядок непосредственного проведения анализа чувствительности следует смотреть в руководстве к используемой программе. В результате проведения анализа чувствительности формируется окончательный список калибруемых параметров.

2.4.3. Проведение этапа автоматической калибрации

Для проведения калибрации модели необходимы те же исходные данные, которые используются для анализа чувствительности. Общий алгоритм проведения автоматической калибрации проиллюстрирован блок-схемой на рисунке 2.2. Это циклический процесс, подбор

осуществляется за некоторое количество итераций. На каждой итерации осуществляется оценка чувствительности по отдельности для каждого из параметров при текущем значении. На основании вычисленной чувствительности обновляются значения всех параметров и вычисляется целевая функция (2.11). Процесс останавливается либо по достижении лимита итераций, и при этом калибровка считается не успешной. Либо выполняется условие минимизации целевой функции – в течение нескольких итераций величина целевой функции изменяется меньше, чем на заранее заданную величину. Альтернативным критерием является изменение значений параметров менее, чем на заданную величину (также в течение нескольких итераций). В этом случае калибровка считается успешной. При этом необходимо иметь в виду, что «успешное» завершение калибровки не гарантирует определение оптимальных значений параметров. В частности, может быть найден локальный минимум целевой функции, тогда как желательно найти ее глобальный минимум. Также следует отметить, что строго нулевое значение целевой функции недостижимо практически даже в синтетических модельных примерах. Перед началом калибровки необходимо задать общие настройки процесса – допустимое количество итераций, критерий успешного выполнения калибровки и другие. Результатом калибровки является набор значений параметров, при котором значение целевой функции было минимальным из всех проверенных.

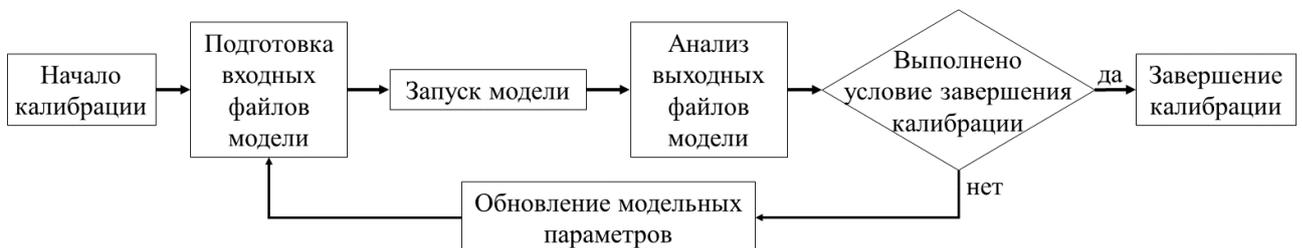


Рисунок 2.2. Блок-схема процесса калибровки одной модели.

Программа завершает процесс калибровки по формальным критериям. Если калибровка остановлена по превышению разрешенного количества итераций, это само по себе свидетельствует о том, что оптимальное сочетание параметров не было найдено. Калибровка может завершиться при формировании такого набора параметров что численное решение прямой задачи не сходится и становится невозможным рассчитать уровни и другие величины. Такая ситуация может возникнуть, например, при моделировании приречного водозабора. Снижение коэффициента фильтрации донных отложений ниже некоторого значения может привести к осушению водозаборных и даже наблюдательных скважин и, соответственно, к невозможности рассчитать требуемые для вычисления целевой функции уровни (понижения).

Завершение считается «успешным» при нахождении минимума целевой функции. В качестве признака нахождения минимума используется относительное изменение параметров между итерациями, имея в виду, что в основе алгоритмов PEST и UCODE лежит метод градиентного спуска. Если расчетное изменение любого из параметров от итерации к итерации меньше некоторого значения (обычно используется 1% [120]) это означает, что изменение параметров на большую величину приведет к росту целевой функции.

Если завершение калибрации не было «успешным», требуется изменение настроек калибрации. Произвести успешную калибрацию после неуспешной может позволить:

- Изменение диапазонов допустимых значений параметров;
- Изменение начальных значений параметров;
- Изменение набора калибруемых параметров;
- Увеличение допустимого числа итераций подбора;
- Изменение алгоритма решения прямой задачи (т.н. солвера);
- Изменение набора наблюдений, исключение «плохих» данных;

В каждом конкретном случае может потребоваться изучение лог-файлов используемых программ, анализ получаемых результатов, поиск дополнительных данных или проведение дополнительных изысканий. Универсальных рекомендаций дать невозможно.

В случае, если упомянутые выше действия все равно не приводят к «успешной» калибрации, то возможно, что на этапе геофильтрационной (геомиграционной) схематизации были допущены ошибки при создании концептуальной гидрогеологической модели объекта. Таким образом, созданная модель недостаточно хорошо отражает специфику протекания исследуемого гидрогеологического процесса, поэтому следует вернуться к этапу схематизации.

2.5. Методика совместной калибрации

Как указано в первой главе, для расчета полей напоров, концентраций и температур требуются разные математические модели. Эти математические модели обычно калибруются отдельно друг от друга, что увеличивает трудозатраты на проведение калибрации и понижает ее точность. Раздельная калибрация моделей связана, в том числе, с последовательностью разработки моделей. В первую очередь разрабатывается геофильтрационная модель. Уже на ее основе разрабатывается геомиграционная модель, поскольку массо- и теплоперенос непосредственно зависит от скорости фильтрации, которую в любой точке модели можно рассчитать на основе поля напоров.

Распространенной практикой является раздельное использование наблюдений различных типов. Сначала геофильтрационная модель калибруется по замерам напоров подземных вод. Только после этого разрабатывается и калибруется геомиграционная модель. Процесс калибрации

каждой из разрабатываемых моделей можно проиллюстрировать блок-схемой на рисунке 2.2. Этот процесс повторяют для каждой из моделей. При этом, если не удалось откалибровать геомиграционную модель, приходится возвращаться к геофильтрационной модели и пересматривать принятые решения, например значения параметров или геофильтрационную схему. За счет этого работа над прогнозной моделью для сложных объектов замедляется и идет неэффективно. Такая же процедура может возникнуть при использовании на одном и том же объекте нескольких моделей одного и того же процесса. При этом, все связанные модели разрабатываются с использованием общих значений параметров, принятых на этапе проведения схематизации.

Введем понятие совместной калибрации, в которой совместно анализируются данные разных типов наблюдений, разные расчетные модели одного процесса и модели разных процессов. При таком подходе типизация задач совместной калибрации может быть выполнена по двум характеристикам: типам данных, используемых для калибрации и моделям процессов, рассматриваемых на данном объекте. В таблице Таблица 2.3 приведена типизация задач совместной калибрации, выполненная по указанному принципу. Для одномодельной совместной калибрации можно использовать стандартную методику, описанную выше. Для многомодельной совместной калибрации стандартную методику [99] требуется изменить для применения к совместному запуску нескольких моделей. Очевидным образом, модели, предлагаемые к совместной калибрации, должны быть тем или иным образом связаны. Например, модель геомиграции или теплопереноса напрямую зависит от модели геофильтрации. Разные (по масштабу или по времени) геофильтрационные модели одного и того же участка используют общие геофильтрационные параметры. Калибрация моделей производится после завершения их первичной разработки и производится для всех моделей одновременно, с использованием всех доступных типов наблюдений (см. рисунок 2.3). Мы предполагаем, что такой подход в ряде случаев может быть более оптимальным, так как при анализе результатов можно будет выявлять ошибки и неточности в моделях на всех этапах моделирования сразу. Также предполагается, что совместное использование всех доступных типов наблюдений позволит повысить чувствительность некоторых параметров и улучшить точность получаемых значений параметров в целом. В последующих главах будут рассмотрены как синтетические, так и реальные объекты для проверки данного предположения.

Важно, что реализация автоматического процесса поиска минимума целевой функции в рамках блок-схемы, показанной на рис. 2.3 может быть выполнена с использованием упоминаемых ранее стандартных средств автоматической калибрации PEST и UCODE.

Таблица 2.3. Типы совместной калибровки.

Процесс		Наблюдения	
		Один тип	Несколько типов
Один	Одна модель	<i>Обычная калибровка.</i> Пример – калибровка геофильтрационной модели по напорам.	<i>Одномодельная совместная калибровка.</i> Пример – калибровка геофильтрационной модели по напорам и разгрузкам в реки. Рассмотрен в главе 5.
	Две и более моделей	<i>Многомодельная совместная калибровка.</i> Пример – совместная калибровка пересекающихся геофильтрационных моделей стационарного потока и опытно-фильтрационных работ. Рассмотрен в главе 4.	<i>Многомодельная совместная калибровка.</i> Пример – совместная калибровка модели стационарного потока по уровням и разгрузкам в реки и моделей-врезок ОФР по данным понижений.
Два и более		–	<i>Многомодельная мультипроцессная совместная калибровка.</i> Пример – калибровка геофильтрационной и геомиграционной моделей по уровням и концентрациям. Рассмотрен в главе 3.

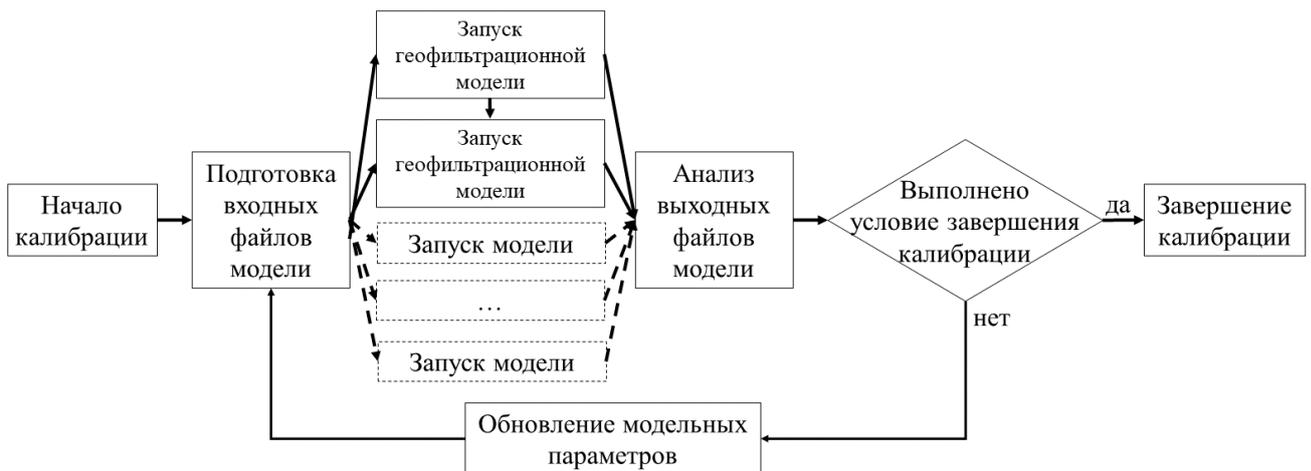


Рисунок 2.3. Блок-схема процесса совместной калибровки нескольких моделей.

2.6. Оценка результатов калибровки

Варианты условий, при которых калибровка будет завершена, приведены в параграфе 2.4.3. В рамках алгоритма автоматической калибровки (реализованного в упомянутых ранее программах PEST и UCODE) критерием успешного завершения является нахождение минимума целевой функции. Очень важно учитывать, что найденный минимум целевой функции может быть локальным, а не глобальным. Может оказаться, что успешное завершение процесса калибровки по формальному критерию не является успешным с точки зрения решаемой задачи. Результатом калибровки является набор значений параметров, при котором значение целевой функции было минимальным *из всех проверенных*. По каким-либо причинам, оптимальный набор

параметров мог быть не проверен в процессе подбора. Это может быть обусловлено заданными интервалами допустимых значений параметров, заданными начальными значениями, разрешенным количеством итераций и другими настройками.

По этой причине после завершения калибровки необходимо провести верификацию, то есть проверить, насколько хорошо модель воспроизводит наблюдения. В первую очередь, необходимо проверить наблюдения, использованные при калибровке. Кроме того, при возможности, следует проверить, насколько хорошо модель воспроизводит наблюдения, не использованные для ее калибровки.

Для этого может быть использовано несколько показателей [99]. Целевая функция мало подходит для верификации модели. Само по себе значение целевой функции не может быть использовано для оценки того, насколько хорошо модель воспроизводит рассматриваемые процессы. Значение целевой функции может быть использовано в качестве быстрой оценки результата калибровки при сравнении значений, полученных на одинаковых наборах наблюдений и весовых коэффициентов. Например, можно оценить снижение ошибки при сравнении начального и конечного значений целевой функции в пределах одной попытки калибровки. Также значение целевой функции может быть использовано для сравнения результатов попыток калибровки, при условии неизменности весовых коэффициентов.

Для верификации модели в первую очередь напрямую сравнивают результаты моделирования и наблюдения в контрольных точках. Сравнение можно проводить как по значениям в отдельных точках, так и в графическом виде, для наглядности. Отдельно следует проверить контрольные точки, в которых рассчитаны наибольшие невязки. Наибольшие невязки между моделью и наблюдениями могут быть связаны с техническими ошибками, которые необходимо исправить, прежде чем приступить к дальнейшему анализу [99]. Например, при дополнительной проверке может быть обнаружена ошибка высотной привязки устья скважины, или ошибочное задание положения фильтра скважины в модели.

Результаты моделирования чаще всего представляются либо в виде картограмм, либо в виде графиков. Для наглядного сопоставления результатов моделирования и наблюдения чаще всего используется два типа графиков: временной и точечный. На временном графике, очевидно, представляется изменение измеряемой величины со временем. Анализ временных графиков требует учета специфики моделируемого процесса. При этом возможно диагностировать конкретные недостатки модели по особенностям графика, которые не могут быть диагностированы по обобщенным численным критериям.

На точечный график выносятся данные по контрольным точкам. По одной оси откладываются фактические наблюдения, по другой оси откладываются расчетные значения. Обыкновенно точечные графики строятся отдельно по разным группам наблюдений. Точечный график представляет собой обзор большого числа наблюдений и позволяет как качественно

оценить общую невязку между моделью и наблюдениями, так и выявить систематические отклонения. На рисунке 2.4 представлены примеры точечных графиков. В идеальном случае расчетные величины должны быть равны фактическим, и все точки должны расположиться на линии равенства. На рисунке 2.4а показан пример точечного графика для откалиброванной модели. Контрольные точки расположены вблизи линии равенства, систематического отклонения нет. Невязки приблизительно равны для всего диапазона измерений, и приблизительно с равной вероятностью распределены невязки положительные и отрицательный.

На рисунке 2.4б показано два примера с наглядным систематическим отклонением. На модели речного бассейна такие точечные графики могут использоваться для диагностики ошибок. Вариант 1 на рисунке 2.4б может свидетельствовать о заниженном фильтрационном сопротивлении донных отложений, вследствие чего расчетные уровни подземных вод повсеместно ниже фактических. Вариант 2 может свидетельствовать о заниженной проводимости водоносного горизонта, вследствие чего расчетные уровни на водоразделе существенно превышают фактические. Кроме непосредственного сопоставления расчетных и фактических величин в формате точечного графика также представляется сопоставление невязок с фактическими величинами. На рисунке 2.5 представлены графики невязок, соответствующие рисунку 2.4. Использование невязок вместо расчетных величин позволяет в некоторых случаях более наглядно показать наличие или отсутствие систематических отклонений. Что более важно, возможно использование взвешенных величин в случае выделения групп замеров с различными весовыми коэффициентами. Такой пример рассмотрен в главе 4. Использовано три группы наблюдений, весовые коэффициенты находятся в диапазоне $100 - 17000 \text{ м}^{-2}$ (Таблица 4.4). На точечных графиках взвешенных невязок (рисунки 4.29 – 4.31) вынесены все используемые замеры которые, с учетом весов, имеют одинаковый порядок величин.

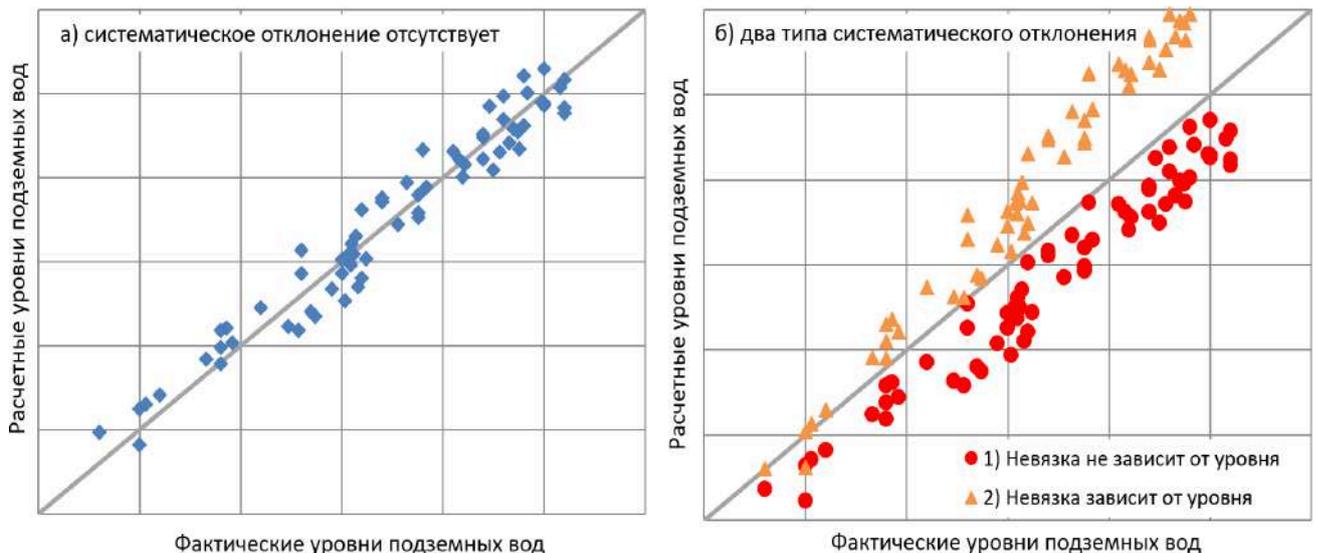


Рисунок 2.4. Примеры точечных графиков.

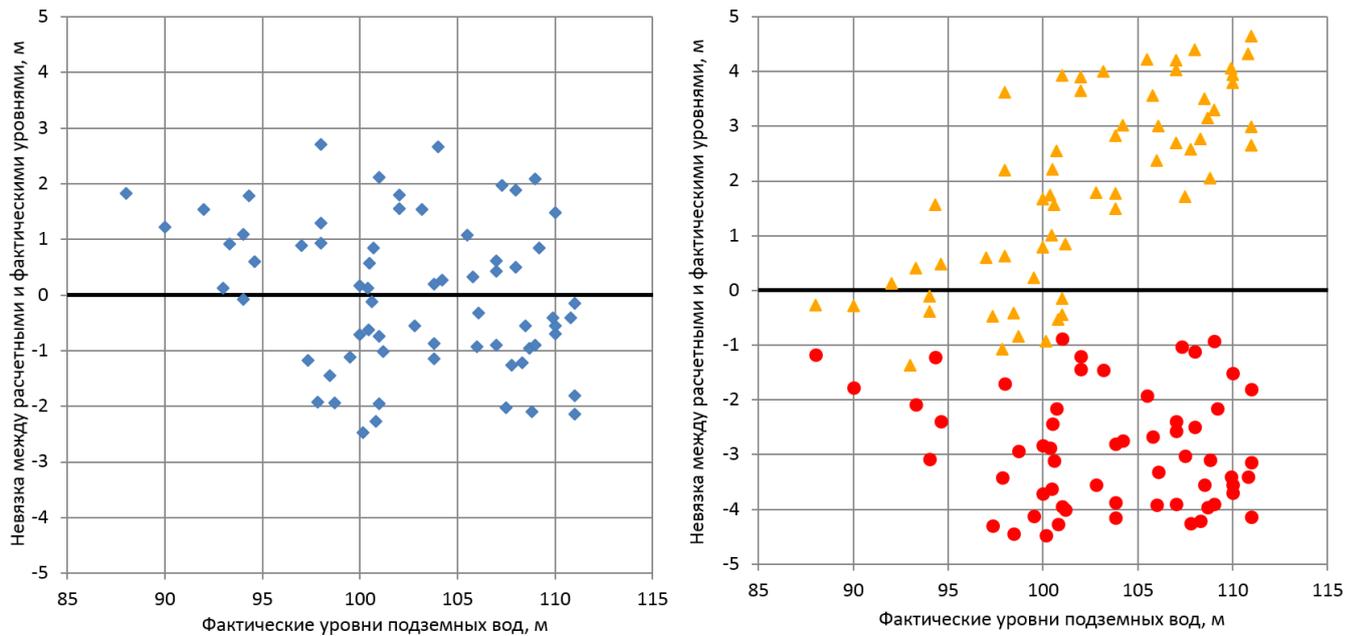


Рисунок 2.5. Примеры графиков невязок.

Кроме абсолютного значения целевой функции существует еще несколько критериев, по которым можно оценить, насколько хорошо модель воспроизводит природные условия. Чаще всего требуется, чтобы модель воспроизводила известные величины «в среднем». Например, отклонения расчетных уровней от фактических в большую и в меньшую сторону должны быть равны. Считается [74; 99], что в откалиброванной модели, правильно воспроизводящей рассматриваемые процессы, невязки между расчетными и фактическими уровнями обусловлены исключительно случайными факторами, и распределение невязок должно соответствовать нормальному. Величина невязок в целом по модели характеризуется дисперсией этого нормального распределения, меньшая величина дисперсии отражает меньшее расхождение между расчетными и фактическими значениями. Средняя невязка должна быть равна нулю.

В связи с этим, одними из наиболее распространенных критериев являются показатели нормального распределения – математическое ожидание и дисперсия (стандартное отклонение). В первую очередь, требуется проверить соответствие распределения невязок нормальному. Для наглядного представления формы распределения используется гистограмма частот и точечный график квантиль-квантиль (КК-график или Q-Q plot) [137]. Гистограмма позволяет напрямую сравнить форму распределения невязок с графиком плотности вероятности нормального распределения (Рисунок 2.6). На графике квантиль-квантиль отображается соотношение квантилей фактических невязок теоретическим, и если распределение невязок соответствует нормальному, то КК-график должен представлять собой прямую линию (Рисунок 2.7).

Следует обратить внимание, что пример, приведенный на рисунках 2.6 и 2.7 – синтетический. С использованием языка R [122], предназначенного для статистической

обработки данных, была сгенерирована последовательность из 1000 случайных значений, соответствующая нормальному распределению с математическим ожиданием, равным 0 и дисперсией, равной 1. При сравнении с теоретической плотностью значений на рисунке 2.6 видны отклонения от нормального закона. Так же и на КК-графике на рисунке 2.7 видны отклонения в областях минимальных и максимальных значений. Математическое ожидание и стандартное отклонение (0.045 и 0.97, соответственно) также отличаются от заранее заданных параметров.

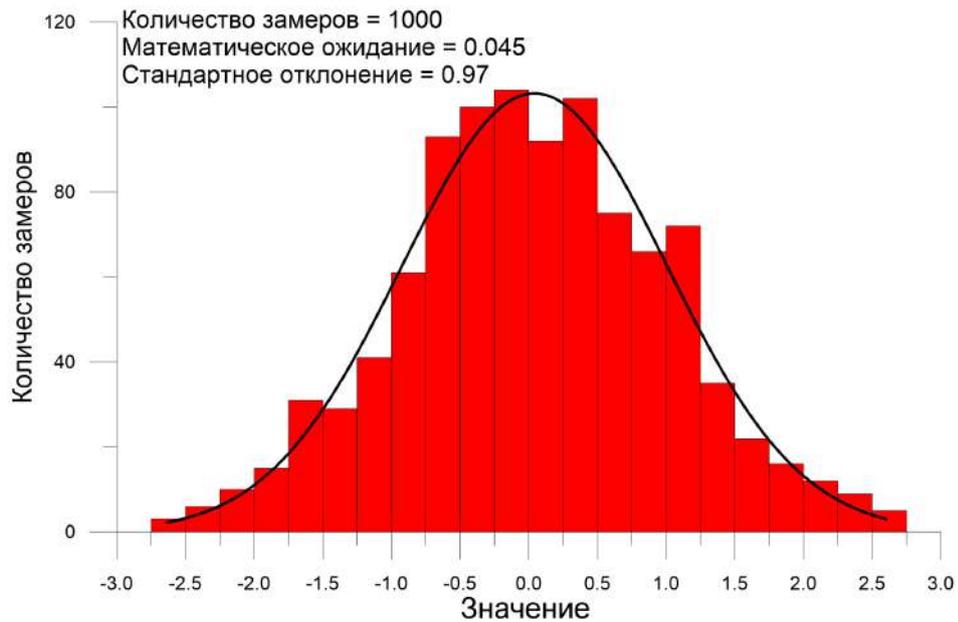


Рисунок 2.6. Примеры гистограммы частоты невязок.

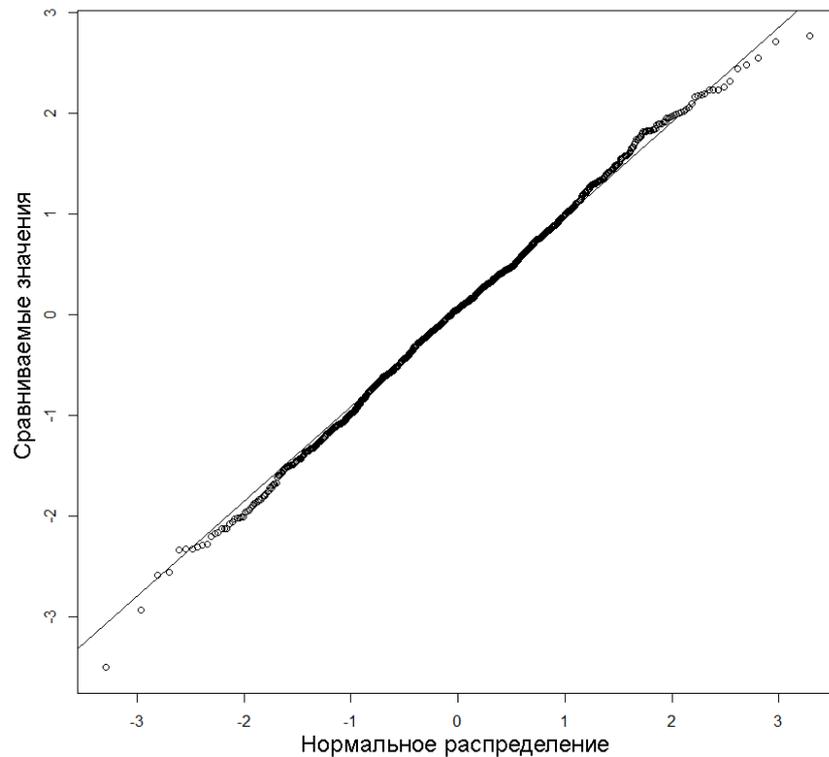


Рисунок 2.7. Пример графика квантиль-квантиль.

Эти отклонения связаны с ограниченным количеством значений в сгенерированной выборке. В то же время количество замеров на практике часто существенно меньше тысячи. В рассмотренных в данной работе примерах количество используемых наблюдений следующее:

- На водозаборе ВПС-4 г. Воронеж (раздел 4.2) всего использовано 1379 замеров. В первую очередь, такое большое количество замеров связано с частыми замерами понижений при проведении откачки. Количество использованных режимных замеров уровней подземных вод существенно ниже (100 замеров)
- Для калибровки модели бассейна р. Хворостань (раздел 5.1) всего использовано 73 замера.
- Для калибровки модели бассейна р. Судогда (раздел 5.2) всего использовано 58 замеров.

Таким образом, нельзя ожидать, что распределение невязок по сравнительно небольшому количеству замеров будет строго соответствовать нормальному закону. Зачастую соответствие распределения нормальному закону оценивается «на глаз» при сопоставлении фактической гистограммы и эталонного графика (как на рисунке 2.6). В то же время, для оценки соответствия распределения какому-либо закону существуют разнообразные численные критерии. Применительно к нормальности это критерии хи-квадрат, Колмогорова-Смирнова, Шапиро-Уилка и множество других. Например, в книге «Testing for Normality» [137], которая целиком посвящена этому вопросу, приводится сравнение 28 критериев нормальности. В более широкой монографии «Прикладная математическая статистика» [26] приводится сравнение 21 критерия. В указанных и в множестве других публикаций рекомендуется для проверки экспериментальных распределений на нормальность в первую очередь использовать критерий Шапиро-Уилка (Shapiro-Wilk), поскольку он имеет сравнительно большую статистическую мощность на небольших выборках. Это важно для проверки распределения невязок модели, когда фактическое количество замеров может быть небольшим и графические методы оценки неприменимы. В своей статье 1968 года [132] Шапиро и Уилк продемонстрировали преимущества своего критерия на выборках от 10 до 50 замеров.

Критерий Шапиро-Уилка основан на отношении оптимальной линейной несмещенной оценки дисперсии к ее оценке методом максимального правдоподобия [26]. Величина критерия W определяется как:

$$W = \frac{\left[\sum_{i=1}^{n/2} a_{n-i+1} (y_{n-i+1} - y_i) \right]^2}{\sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2} \quad (2.14)$$

где y_i – элемент выборки; a_i – специальные коэффициенты; n – размер выборки; $n/2$ округляется до целого вниз. Величина отношения оценок дисперсии W сравнивается с табличной

величиной $W_n(\alpha)$ (где α – статистическая значимость). При $W > W_n(\alpha)$ гипотеза о том, что выборка соответствует нормальному распределению, принимается.

Изначально авторы составили таблицы коэффициентов a_i и $W_n(\alpha)$ для выборок размером до 50. В современных статистических библиотеках (например, в упомянутом выше языке R [122]) реализован усовершенствованный алгоритм вычисления, в котором коэффициенты для выборок более 50 элементов вычисляются [127]. Усовершенствованный критерий Шапиро-Уилка формально применим для выборок размером от 3 до 5000 элементов, однако практическое его применение рекомендуется для выборок размером более 20 [127].

Необходимо отметить, что ни один из приведенных в данном разделе способов оценки результатов моделирования не может однозначно свидетельствовать о «правильности» модели сам по себе. Различные оценки необходимо использовать в комплексе, что показано на примерах в главах 3-5. При оценке успешности калибровки модели Южно-Воронежского месторождения, описанной в разделе 5.1, учитывались следующие показатели:

- Величина целевой функции снизилась с 9968 до 1004 д.е.;
- При графическом представлении фактических и расчетных уровней отсутствуют выраженные систематические отклонения;
- Критерий Шапиро-Уилка для использованных 67 замеров уровней равен 0.986, что больше критического значения при статистической значимости 0.95:
 $W_{67}(0.95) = 0.9641$ и подтверждает предположение о нормальном распределении невязок;
- Средняя невязка уровней снизилась с +8 м до -0.55 м; Общая невязка расходов снизилась с 35% до 5%.
- Стандартное отклонение невязок уровней снизилось с 4.07 м до 1.67 м;

Таким образом в настоящей главе на основе систематизации опубликованных результатов и исследований автора проведена типизация условий применения совместной калибровки моделей гидрогеологических процессов, а совершенная методика полуавтоматической калибровки геофильтрационных моделей расширена на случай совместной многомодельной и многопроцессной калибровки.

Глава 3. Тестирование методики совместной калибровки

Целью данной главы является проверка сформулированной в главе 1 рабочей гипотезы о том, что совместный анализ разнородных данных наблюдений в процессе калибровки позволяет более результативно калибровать геофильтрационные и геомиграционные модели. Для этого в данной главе проводится тестирование и анализ преимуществ методики совместной калибровки моделей разных процессов. Этот анализ выполняется на тестовых моделях, то есть на моделях, в которых заранее известно точное распределение калибруемых параметров. Данный прием достаточно широко используется в методических работах по оценке эффективности тех или иных калибровочных подходов, когда есть точная модель с известными параметрами, по которой пытаются восстановить по “наблюдениям” [54, 64, 88, 145]. Таким образом, калибруя такие модели по ограниченному набору “исходной” информации, полученной при решении прямых задач при известном распределении параметров, можно оценить, насколько полученные при калибровке эффективные параметры соответствуют их точным значениям. Для тестирования методики выбрана мультипроцессная калибровка геофильтрационного и геомиграционного потока. Этот выбор обусловлен и сложностью построения целевой функции, и выбора весовых коэффициентов, и ограниченным числом публикаций по данной проблеме. С практической точки зрения на участках загрязнения подземных вод, как правило, приходится обосновывать и геофильтрационную, и геомиграционную модели по данным наблюдений и за уровнями, и за концентрациями, поэтому потенциально именно для таких объектов может применяться мультипроцессная совместная калибровка геофильтрационных и геомиграционных параметров.

3.1. Совместная калибровка геофильтрационной и геомиграционной моделей на примере миграции загрязнения из бассейна промстоков

3.1.1. Геологические и гидрогеологические условия

Целью данного раздела является анализ эффективности совместной калибровки моделей двух процессов в сравнении с последовательной. Рассматривается распространение загрязнения в подземных водах при наличии наблюдений за уровнями и концентрацией загрязнителей. В качестве примера использован реальный объект с некоторыми упрощениями существующих геологических и технических условий.

За основу взят участок одного из шламохранилищ Сибирского химического комбината (СХК). Рассматриваемый объект располагается вблизи города Северск в 10 км к востоку от реки Томь на второй надпойменной террасе. Он представляет собой группу хранилищ промышленных отходов различного состава. Из некоторых хранилищ происходят утечки отходов, которые начинают мигрировать с потоком подземных вод и, предположительно, разгружаться в

близлежащие водоемы. Помимо оборудованных хранилищ отходов различного рода на территории СХК существуют другие потенциальные источники загрязнения, такие как выведенные из эксплуатации цеха. На СХК ведутся наблюдения как за уровнями подземных вод, так и за содержанием в них различных компонентов загрязнения [20, 15]. Наличие двух различных типов наблюдений и развитая сеть мониторинга делают этот объект очень удобным для проверки методики калибровки. Границы рассматриваемого участка показаны на рисунке 3.1 они охватывают источники загрязнения и зону разгрузки загрязнения в поверхностные воды.

В геологическом разрезе выделяется палеозойский фундамент и осадочный чехол. Осадочный чехол сложен разнообразными породами в возрастном диапазоне от мелового до четвертичного периода, его мощность составляет примерно 350 м. Подробно геологическое строение региона представлено, например, в монографии [36] и в диссертациях [1, 15]. С участием автора настоящей работы опубликована статья [11], в которой описана общая геофильтрационная и геомиграционная модель полигона захоронения СХК.

Описываемый процесс миграции загрязнения приурочен к самой верхней части, до 40 м от дневной поверхности. Рассматриваемая часть геологического разреза показана на рисунке 3.2. В связи с этим интерес представляют только аллювиальные отложения II надпойменной террасы правого берега р. Томь. В остальной части геологической среды загрязнения, которое может быть связано с рассматриваемыми шламохранилищами, не обнаружено. Отложения, подстилающие аллювий второй террасы, принадлежат к новомихайловской свите олигоцена (P_{3nm}). Эта свита сложена плотными глинами с прослоями и линзами песков, алевритов и бурых углей. Нижняя часть свиты сложена песками с прослоями глин, алевритов и бурых углей.

Ширина второй надпойменной террасы вблизи рассматриваемого участка достигает 4 км, гипсометрический уровень террасы соответствует абсолютным отметкам 95-110 м. Тыловой шов выражен уступом с перепадом высот 5-7 м. Поверхность террасы пологоволнистая с заболоченными западинами и мелкими грядами, поросшими сосновым лесом.

Сложена терраса мелкозернистыми, иногда иловатыми песками, супесями, суглинками. В основании террасы залегают горизонты гравийно-галечниковых отложений. Цоколь террасы представлен размытой поверхностью олигоценых отложений (Рисунок 3.2). Упомянутые выше источники загрязнения располагаются вблизи тылового шва второй террасы.

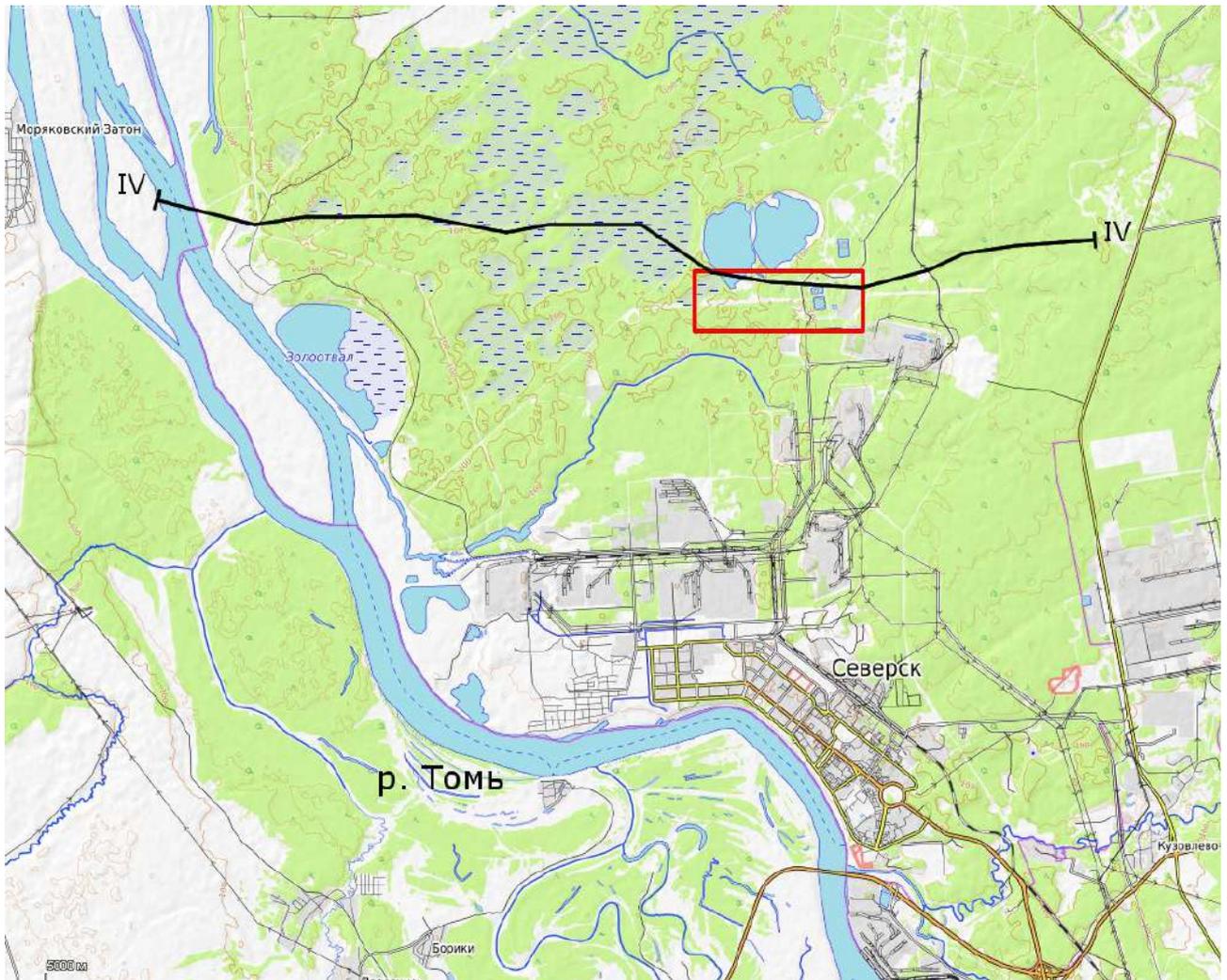


Рисунок 3.1. Схема расположения рассматриваемого участка.

Условные обозначения

СТРАТИГРАФИЧЕСКИЕ ПОДРАЗДЕЛЕНИЯ			
Палеогеновая система			
<i>Нижний олигоцен</i>			
	Новомихайловская свита		Эоловые отложения на террасах
<i>Верхний олигоцен</i>		<i>Голоцен - верхний плейстоцен</i>	
	Лагернотомская свита		Озёрно-болотные отложения котловин на террасах
Неогеновая и четвертичная системы нерасчленённые		<i>Голоцен</i>	
<i>Верхний плиоцен-Эоплейстоцен</i>			Аллювиальные и озёрно-болотные отложения высокой поймы р.Томь и её крупных притоков
	Кочковская свита		Аллювиальные отложения низкой поймы р.Томь и её крупных притоков
Четвертичная система			Аллювиальные и пролювиальные отложения мелких речек, ручьев и ложбин временного стока
<i>Нижний-средний плейстоцен</i>			Техногенные отложения
Тайгинская свита. Озёрно-аллювиальные отложения		ЛИТОЛОГИЧЕСКИЙ СОСТАВ ОТЛОЖЕНИЙ	
	Первый (нижний) ритм		Техногенные отложения
	Второй ритм		Торф
	Третий ритм		Песок
	Четвёртый ритм		Галька, гравий
	Пятый (верхний) ритм		Супесь
<i>Средний плейстоцен</i>			Суглинок
Аллювиальные отложения III-ей н/п террасы р.Томь			Глина
	Первый (нижний) ритм	ПРОЧИЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ	
	Второй (средний) ритм		Скважина. Вверху - номер, в скобках - абсолютная отметка устья; внизу - глубина, м.
	Третий (верхний) ритм		Глубина до уровня грунтовых вод, м.
<i>Верхний плейстоцен</i>			Глубина до уровня грунтовых вод, м.
Аллювиальные отложения II-ой н/п террасы р.Томь			Стратиграфическая граница
	Нулевой ритм		Граница ритмов
	Первый (нижний) ритм		Литологическая граница
	Второй (средний) ритм		
	Третий (верхний) ритм		
	Аллювиальные отложения I-ой н/п террасы р.Томь		
	Аллювиальные отложения I-ой н/п террасы притоков р.Томь		

Рисунок 3.26. Условные обозначения к разрезу по линии IV-IV.

3.1.2. Постановка задачи

На СХК существует сеть мониторинга, используемая для наблюдения за состоянием подземных вод. В пределах рассматриваемого участка расположено большое количество наблюдательных скважин. Наблюдения показывают наличие загрязнения в подземных водах, предполагаемый контур загрязненных подземных вод показан на рисунке 3.3. Загрязнение поступает в водоносный горизонт аллювиальных отложений из нескольких источников, и с потоком подземных вод мигрирует в направлении водохранилища. Модель этого процесса и была использована для отработки методики совместной калибровки. Необходимо отметить, что поскольку решалась методическая, а не производственная задача, была создана модель, упрощенно описывающая существующие условия.

Несмотря на большой объем доступных наблюдений, обусловивший выбор данного объекта, для опробования методики совместной калибровки, было принято решение не использовать известные наблюдения. Для сравнения эффективности и результативности различных подходов к калибровке моделей полезно иметь возможность сравнить полученные значения параметров с истинными.



Рисунок 3.3. Схема рассматриваемого участка.

По этой причине выбран подход, позволяющий сравнить результаты калибровки, проведенной по различным методикам с «истинными» значениями параметров. Он заключается в использовании в качестве наблюдений не полевых замеров, а результатов

модельного решения прямых геофильтрационной и геомиграционной задач. Порядок действий был следующий.

1. Проводится геофильтрационная схематизация.
2. На основе геофильтрационной схемы разрабатывается геофильтрационная модель.
3. На ее основе создается геомиграционная модель.
4. В созданные модели задаются некоторые значения параметров, которые являются «истинными».
5. Решаются прямые геофильтрационная и геомиграционная задачи.
6. В точках, соответствующих наблюдательным скважинам, сохраняются результаты моделирования в форме, аналогичной реальным наблюдениям.
7. Значения параметров изменяются на произвольные, после чего модель готова для калибровки.

Исследование проводилось по схеме слепого эксперимента. Разработка исходной модели, начиная с 4 пункта, проводилась независимо от автора. Таким образом, исключается осознанная или неосознанная подгонка значений калибруемых параметров каким-либо образом в процессе калибровки.

В данной работе «истинные» значения калибруемых параметров приведены в параграфе, посвященном разработке модели. Поэтому необходимо особо отметить, что на момент проведения калибровки модели автор не знал, какие значения должны быть получены и имел возможность оценивать эффективность различных методов только путем сравнения результатов моделирования и предоставленных наблюдений.

3.1.3. Геофильтрационная схематизация и описание модели

Общая структура потока сравнительно простая. В целом, региональный поток подземных вод направлен в сторону реки Томь, которая является региональной дренажной [158]. На выбранном участке это направление с востока на запад. По данным замеров в аллювиальных отложениях прослеживается снижение уровней грунтовых вод в том же направлении (рисунке 3.3). Частично поток подземных вод разгружается в ближайшие водохранилища. Питание осуществляется за счет инфильтрации атмосферных осадков и утечек из хранилищ промышленных отходов.

Для расчетов миграции выбран временной масштаб, соответствующий периоду работы СХК. Таким образом, смоделированная область загрязнения подземных вод должна быть похожа на современную. Заводы комбината действуют с 1950-х годов, но для отработки методики совместной калибровки точное время эксплуатации несущественно. Поэтому продолжительность расчетного периода выбрана равной 20000 сут, что приблизительно равно

55 годам. Предполагается, что загрязнение с потоком подземных вод мигрирует со скоростью переноса, определяемой среднемноголетней скоростью геофильтрационного потока. На основании этого предположения было принято решение моделировать стационарный фильтрационный поток.

Область моделирования охватывает всю показанную на схеме (Рисунок 3.3) территорию, ее размер составляет 3600×1300 м. Указанных размеров достаточно, чтобы охватить всю область распространения загрязнения от рассматриваемого шламохранилища. Эта область равномерно разбита на квадратные ячейки со стороной 25 м (Рисунок 3.4). Как указано выше, аллювиальные отложения второй террасы подстилаются отложениями новомихайловской свиты *Р_{3пт}*. Мощность этой свиты составляет от 30 до 100 м и значительная ее часть – глины, которые являются слабопроницаемыми отложениями [154]. В связи с этим принято, что взаимодействие с нижележащими водоносными горизонтами через отложения новомихайловской свиты отсутствует. Поэтому разрезе модель охватывает только аллювиальные отложения второй надпойменной террасы р. Томь. На территории СХК аллювиальные отложения представляют собой песчано-суглинистую толщу, в которой выделяются отдельные прослои. Подробный геологический разрез [151] генерализован в виде 4 слоев с чередованием хорошо- и слабопроницаемых слоев. В первый и третий и четвертый слои объединены преимущественно песчаные отложения, во втором и четвертом – преимущественно суглинистые. При этом третий слой является самым мощным и высоко проницаемым, и его дополнительно разделили на два модельных слоя. Таким образом, модельная сетка состоит из 5 слоев.

Граничные условия для данной тестовой модели были также упрощены, с сохранением общей структуры потока – с востока на запад. Поток в модели формируется за счет инфильтрационного питания, поступающего на верхнюю границу. Для инфильтрационного питания выделено несколько зон с различной интенсивностью питания. В пределах модели можно выделить два участка с различным уклоном: практически горизонтальная поверхность II террасы, и склон вблизи ее тылового шва. Поскольку на этих участках уклон различается, инфильтрация атмосферных осадков должна идти с различной интенсивностью. Поэтому в пределах модели выделено две крупные зоны с различной величиной инфильтрации. Также, в модели создана небольшая область повышенной инфильтрации, которая является моделируемым источником загрязнения. Границы зон с различной величиной инфильтрации обозначены на рисунке 3.4.

На западной границе принято ГУ III рода, с постоянным напором, равным 89.4 м и условной проводимостью, приблизительно соответствующей фильтрационным параметрам аллювиальных отложений в целом. Прочие внешние границы заданы непроницаемыми.

Внутренними границами являются водохранилища и хранилища промышленных отходов. Они схематизируются как ГУ III рода с известным уровнем и условной проводимостью, соответствующей донным отложениям (для водохранилища) и глинистому экрану (для хранилищ).

Таким образом, поток формируется за счет инфильтрационного питания и частично за счет утечек из хранилищ. Разгружается поток на западной внешней границе модели и частично в водохранилища.

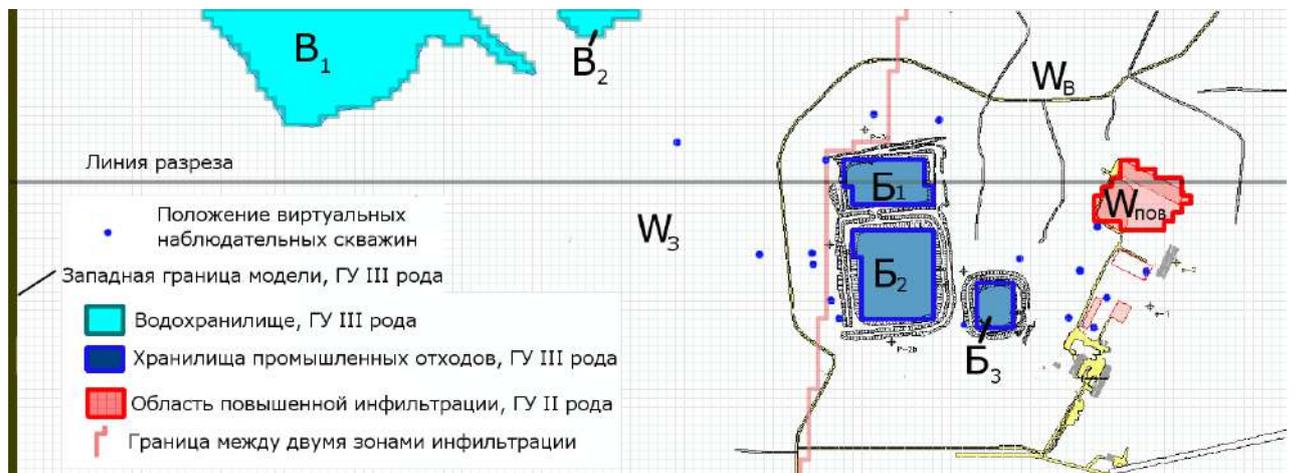


Рисунок 3.4. Схема модельной сетки с граничными условиями. Условные названия зон граничных условий показаны индексами.

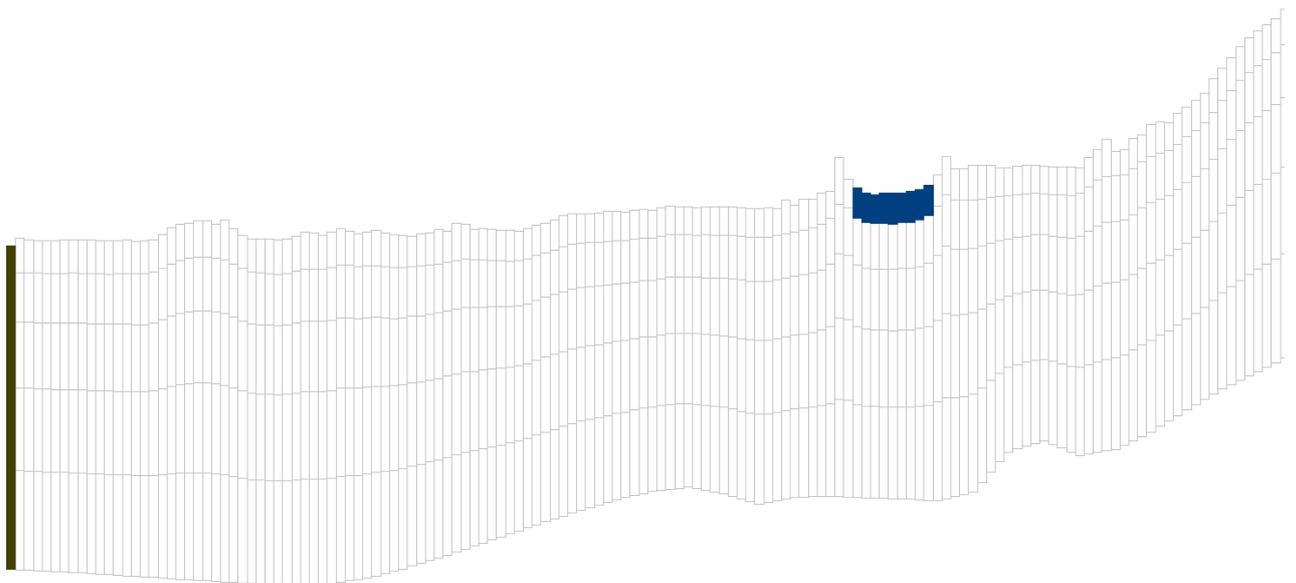


Рисунок 3.5. Разрез модели вдоль 20-й строки модельной сетки.

В этой главе и далее, при описании моделей употребляется термин «модуль». Если не указано иного, имеются в виду различные модули программы Modflow, отвечающие за различные элементы геофильтрационной схемы. Подробно особенности каждого модуля (в оригинале – Package) описаны в руководстве по работе с Modflow [96] и в онлайн-справочнике, расположенном на сайте USGS по адресу <http://water.usgs.gov/ogw/modflow/MODFLOW.html>.

Инфильтрационное питание задано в модели как граница с постоянным расходом (модуль “Recharge”). Кроме того, поступление воды в водоносный горизонт идет за счет утечек из хранилищ промышленных отходов. Эти хранилища заданы в модели как граничные условия III рода через модуль “River”. Водохранилища, в которые идет разгрузка подземных вод, также заданы через модуль “River”. Подробнее параметры этих границ представлены в таблице 3.3. В блоках модели, в которых задано граничное условие III рода, инфильтрация задана равной нулю.

Для моделирования геомиграции был задан ряд необходимых параметров. Значения параметров заданы не противоречащими свойствам моделируемых аллювиальных пород, но специального обоснования геомиграционных параметров не производилось. Также геомиграционные параметры заданы одинаковыми во всей модели, несмотря на то что разные модельные слои соответствуют отложениям разного состава. Это допустимо для тестового примера. Поступление мигранта (загрязнения) задано с инфильтрационным питанием. Область поступления загрязнения обозначена красным цветом на рисунке 3.4 и имеет обозначение $W_{пов}$. Моделируется единственный нейтральный, не сорбируемый и не разрушающийся с течением временем мигрант. Концентрация в источнике принята за условную безразмерную единицу. Этого достаточно, чтобы оценить скорость и направление миграции. Концентрация, равная в некоторой точке, например, 0.5, означает что в этой точке концентрация мигранта ровно в два раза меньше, чем в источнике. Эта концентрация является, таким образом, относительной, и использование конкретных единиц измерения не требуется. Начальная концентрация во всей модели задана равной нулю. Для учета дисперсионного рассеяния заданы характерные величины продольной и поперечной дисперсивности для водоносных пластов, сложенных песчано-глинистыми породами [1]. Коэффициент продольной дисперсивности задан равным 1 м. Коэффициент поперечной дисперсивности в горизонтальном направлении задан равным 0.1 м, в вертикальном – равным 0.01 м. Коэффициент диффузии задан равным 1×10^{-4} м²/сут.

Для удобства представления значения параметров модели приведены в нескольких разных таблицах. Основные характеристики модели приведены в таблице 3.1. Свойства границ II рода приведены в таблице 3.2, границ III рода – в таблице 3.3, список использованных параметров приведен в таблице 3.4. Условные названия зон с различными свойствами граничных условий показаны на рисунке 3.4.

Таблица 3.1. Общие характеристики модели.

Число расчетных слоев модели	5
Количество блоков по оси X	144
Количество блоков по оси Y	52
Число наблюдательных скважин для генерации наблюдений за уровнями подземных вод	26
Число наблюдательных скважин для генерации наблюдений за концентрациями	18
Количество «замеров» концентраций	728

Таблица 3.2. Расход на границах II рода.

Величины инфильтрации W_3	110 мм/год
Величины инфильтрации W_B	145 мм/год
Величины инфильтрации $W_{пов}$	3650 мм/год

Таблица 3.3. Свойства границ III рода.

Обозначение граничного условия	Заданный постоянный уровень, АО, м	Положение уровня отрыва, АО, м	Дополнительная проводимость ГУ III рода, м ² /сут
B_1	94.4	93.4	50
B_2	95.5	94.5	50
B_1	100	99	0.0625
B_2	99	98	0.0625
B_3	100	99	0.0625
Западная граница	89.4	-	7

Таблица 3.4. Используемые значения параметров модели.

Название параметра	Описание параметра	Значение параметра	Размерность
$K_{г}^1$	Коэффициент фильтрации отложений в латеральном направлении, слой 1	0.1	м/сут
$K_{г}^2$	То же, слой 2	0.2	м/сут
$K_{г}^3$	« », слои 3 и 4	3.0	м/сут
$K_{г}^5$	« », слой 5	0.2	м/сут
$K_{в}^1$	Коэффициент фильтрации отложений в вертикальном направлении, слой 1	0.1	м/сут
$K_{в}^2$	То же, слой 2	5×10^{-3}	м/сут
$K_{в}^3$	« », слои 3 и 4	0.1	м/сут
$K_{в}^5$	« », слой 5	0.1	м/сут
$n_{э}$	Эффективная пористость, общая для всей модели	0.25	д.е.

Геофильтрационные и геомиграционные параметры модели изменяются по слоям, в пределах каждого слоя они однородны. При указанных значениях были рассчитаны и сохранены уровни и концентрации, в дальнейшем использованные в качестве наблюдений.

Описанная выше модель была создана в программе Processing Modflow. При указанных значениях параметров были решены геофильтрационная и геомиграционная задачи. Прямые задачи решались с помощью упомянутых ранее программ Modflow и MT3DMS. Результаты моделирования были сохранены в 26 точках, положение которых соответствует положению реально существующих наблюдательных скважин. Тем не менее, поскольку для этих скважин не используются реальные наблюдения, скважины названы виртуальными. Список виртуальных скважин и их характеристики приведены в таблице 3.5. Условная система координат показана на рисунке 3.6. Типичные модельные графики изменения концентрации загрязнителя во времени приведены на рисунке 3.7 для скважин E-126 и P-3.

Таблица 3.5. Список виртуальных наблюдательных скважин, использовавшихся при калибровке тестовой модели СХК.

Название скважины	Координата в пределах модели, м		Номер слоя модели	Сохраненная АО уровня, м	Скважина использовалась для сохранения концентраций
	По оси X	По оси Y			
P-1	11410	12385	1	124.60	Нет
P-2	11485	12510	1	125.77	Да
P-3	11410	12485	3 – 4	124.36	Да
P-4	11285	12410	3 – 4	123.54	Да
P-5	11260	12335	3 – 4	123.61	Да
P-6	11185	12360	3 – 4	122.61	Да
P-7	11210	12485	3 – 4	123.02	Да
P-8	11260	12610	3 – 4	123.93	Да
P-10	10485	12810	3 – 4	115.62	Да
P-11	10810	12910	3 – 4	119.24	Да
P-13	10460	12510	3 – 4	115.34	Да
P-15	10535	12360	3 – 4	116.21	Да
P-17	10535	12285	3 – 4	116.14	Нет
P-18	10885	12335	3 – 4	119.83	Да
P-151	10510	12410	3 – 4	115.97	Да
P-1b	10885	12485	1	119.99	Нет
P-2b	10685	12285	1	118.20	Нет
P-3b	10610	12885	1	117.00	Нет
P-7b	10510	12560	1	116.27	Нет
E-122	10460	12535	3 – 4	115.25	Да
E-124	10310	12535	3 – 4	113.61	Да
E-126	10085	12860	3 – 4	110.58	Да
E-127	10635	12935	3 – 4	117.23	Да
E-128	10635	13110	3 – 4	117.10	Нет
E-142	10960	12260	3 – 4	120.58	Нет
E-144	11060	12510	3 – 4	121.60	Да

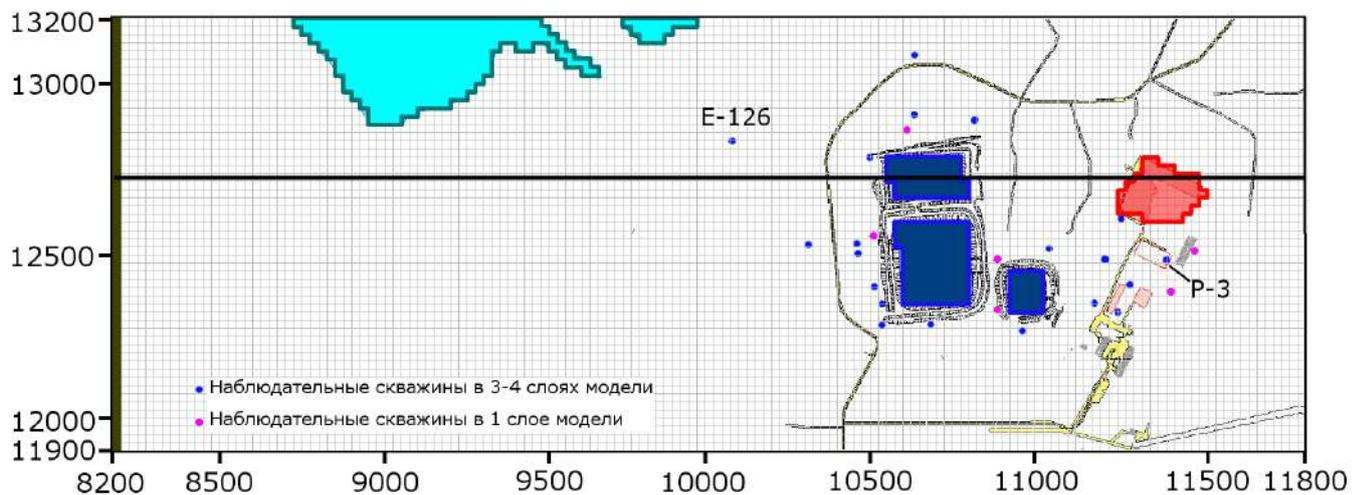


Рисунок 3.6. Условная система координат и положение наблюдательных скважин рассматриваемой модели.

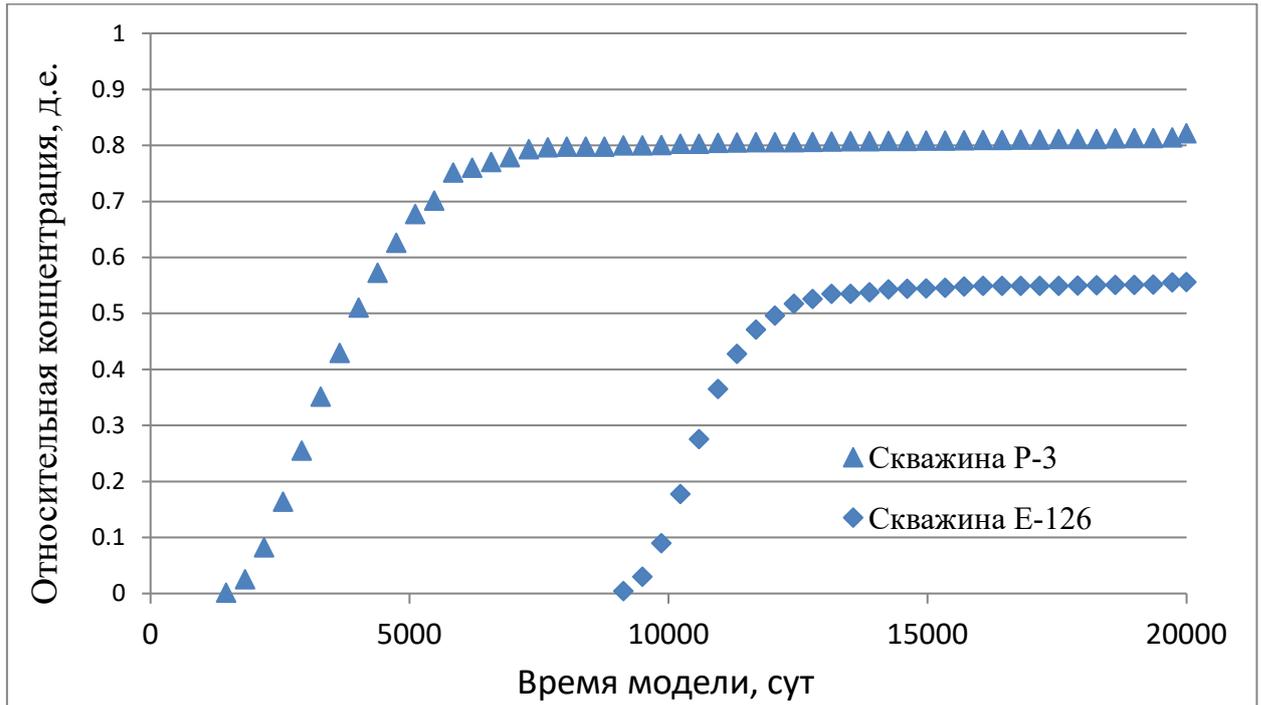


Рисунок 3.7. Выходные кривые миграции загрязнителя в скважинах Р-3 и Е-126.

3.1.4. Калибрация модели

Подробное описание практической реализации процесса совместной калибровки геофильтрационной и геомиграционной моделей приведено в приложении 1.

Для калибровки были выбраны следующие параметры: K^1_g , K^3_g , K^2_v , n_3 , а также значения инфильтрационного питания W_3 , $W_в$, $W_{пов}$. Указанные коэффициенты фильтрации выбраны в соответствии со структурой потока. Как указано выше, ожидается преимущественно горизонтальное направление фильтрации в слоях №1, 3 и 4, и преимущественно вертикальное в слоях №2 и 5. Поэтому для первой группы большее влияние должны оказывать коэффициенты фильтрации в горизонтальном направлении, и для второй группы – в вертикальном. Параметры пятого модельного слоя, скорее всего, не окажут значимого влияния на результаты моделирования геофильтрации и геомиграции. Эффективная пористость n_3 выбрана для калибровки потому, что это единственный параметр, который влияет только на скорость миграции загрязнения, не влияя при этом на расчетное распределение уровней подземных вод. При этом очевидно, что влияние величины эффективной пористости на скорость миграции очень велико, и ее необходимо определить как можно точнее. Величины инфильтрации выбраны для калибровки потому, что инфильтрация в выбранной схеме модели определяет общий баланс рассматриваемого потока подземных вод и, соответственно, разбавление мигрирующего загрязнителя.

Приведенный выбор калибруемых параметров необходимо проверить, проведя формальный анализ чувствительности. Перечисленные параметры выбраны на основании представлений о структуре потока подземных вод. Однако чувствительность результатов моделирования к изменению модельных параметров также зависит от используемых наблюдений. Кроме того, как показано в параграфе 2.2, чувствительность может зависеть от значения модельного параметра. Поэтому анализ чувствительности следует проводить при тех же значениях параметров, с которых будет начата калибровка модели. Начальные значения рассматриваемых параметров приведены в таблице 3.6.

Таблица 3.6. Начальные значения калибруемых параметров

Обозначение параметра	Значение параметра
Коэффициент фильтрации K_{Γ}^1	0.2 м/сут
Коэффициент фильтрации K_{Γ}^3	0.2 м/сут
Коэффициент фильтрации $K_{\text{в}}^2$	0.1 м/сут
Величина инфильтрации W_3	190 мм/год
Величина инфильтрации $W_{\text{ив}}$	190 мм/год
Величина инфильтрации $W_{\text{пов}}$	2200 мм/год
n_3	0.3

Весовые коэффициенты выбраны согласно принципу, описанному в разделе 2.1 с использованием формулы (2.5). Напомним, что весовой коэффициент зависит от величины дисперсии замера σ^2 и количества наблюдений по группам M . Поправочный коэффициент α для уровней и концентраций принят равным 0.5, поскольку пример синтетический и нет оснований предпочесть один из двух типов наблюдений. Поскольку все замеры получены одинаковым способом, весовые коэффициенты всех замеров в пределах группы одинаковы. В общем случае предполагается, что весовой коэффициент может быть определен отдельно для каждого замера, и запись вида $\omega_{i,j}$ означает «весовой коэффициент i -того наблюдения в j -той группе». В данном же случае требуется определить всего два весовых коэффициента, для

групп в целом. Перепишем с учетом сказанного выражение (2.5): $\omega_j = 0.5 \frac{\sum_{j=1}^N M_j}{M_j \sigma_j^2}$.

Дисперсия замеров уровней выбрана исходя из представлений, что при разовых замерах ручными уровнемерами распространенных конструкций ошибка составляет 1 см или 1×10^{-2} м. Эта величина ошибки измерения уровня приведена в ГОСТ 23278-2014 как максимально допустимая. Таким образом, величину 1×10^{-2} м можно считать стандартной ошибкой измерений. Соответственно, дисперсия равна 1×10^{-4} м². Общее количество замеров равно 754,

из них уровней – 26. Все составляющие для расчета весового коэффициента определены, для уровней он будет равен $\omega_H = 0.5 \frac{754}{26 \times 10^{-4} \text{ м}^2} = 1.45 \times 10^5 \text{ м}^{-2}$.

Для концентраций определить стандартную ошибку на основании методики измерений невозможно, поскольку использована расчетная безразмерная концентрация. По этой причине стандартную ошибку для концентраций придется определить исходя из общей предпосылки о равенстве вклада групп наблюдений в целевую функцию. Возможным показателем является общий диапазон возможного изменения величин. Уровни изменяются в диапазоне от 89.4 до ~130 м, концентрации изменяются от 0 до 1 д.е. Диапазон изменения различается в 40 раз. В качестве первого приближения ошибка для концентраций задана на порядок меньше, чем для уровней, то есть 1×10^{-3} д.е., дисперсия равна 1×10^{-6} д.е. С учетом количества наблюдений весовой коэффициент для концентраций равен $\omega_C = 0.5 \frac{754}{728 \times 10^{-6}} = 5.2 \times 10^5 \text{ д.е.}$

При этих условиях была оценена чувствительность выбранных параметров по сравнению со всеми геофильтрационными параметрами модели. Методика оценки чувствительности приведена в разделе 2.2. В таблице 3.7 приведены относительные величины чувствительности *css*. За условную единицу принята максимальная чувствительность, в данном случае, у параметра питания $W_{\text{пов}}$.

Таблица 3.7. Относительная чувствительность параметров модели.

Параметр	Относительная величина чувствительности <i>css</i>		Параметр	Относительная величина чувствительности <i>css</i>
K_{Γ}^1	0.25		$K_{\text{в}}^3$	0.13
K_{Γ}^2	0.03		$K_{\text{в}}^5$	0.001
K_{Γ}^3	0.11		W_3	0.07
K_{Γ}^5	0.01		$W_{\text{в}}$	0.84
$K_{\text{в}}^1$	0.003		$W_{\text{пов}}$	1.00
$K_{\text{в}}^2$	0.13		n_3	0.40

В целом, формальная оценка подтверждает экспертный выбор параметров. Однако, величина *css* для параметра W_3 на порядок меньше, чем для двух других параметров питания. Кроме того, чувствительность вертикальных коэффициентов фильтрации слоя 2 и 3-4 оказалась практически одинаковой.

На основании проведенного анализа чувствительности выбор параметров скорректирован. К исходному набору калибруемых параметров добавлен $K_{\text{в}}^3$, так как его чувствительность близка к параметру $K_{\text{в}}^2$. Также можно рассмотреть исключение параметра W_3 ввиду его

сниженной чувствительности. При решении реальной задачи низкая чувствительность означает, что параметр будет оценен с низкой точностью, и, возможно, оценки его значения другими методами окажутся точнее, чем калибрацией. Но в данном случае, для тестовой задачи с искусственно заданными параметрами, заведомо известно, что начальное значение параметра может значительно отличаться от «истинного». Кроме того, невозможно оценить ту величину инфильтрационного питания другими методами. Поэтому параметр W_3 оставлен в качестве калибруемых, но следует заранее отметить, что его откалиброванное значение ожидается менее точным, чем для двух других параметров питания.

При последовательной калибрации процесс разделялся на два этапа. На первом этапе калибрации (геофильтрационной модели) подбирались значения коэффициентов фильтрации и инфильтрации. На втором этапе калибрации (геомиграционной модели) подбиралось значение одного параметра, активной пористости. При совместной калибрации для каждой итерации требуется выполнить и геофильтрационную, и геомиграционную модели, без разделения на этапы.

На одном и том же компьютере расчет геомиграционных задач занимает больше времени, чем геофильтрационных. В разработанной модели геофильтрационный поток стационарный, что вкупе с небольшим количеством расчетных ячеек позволяет завершить расчет геофильтрационной модели очень быстро. Один запуск требовал примерно 5 секунд. Геомиграционная задача рассчитывалась дольше, и один запуск требовал примерно 2 минуты. Таким образом, совместная калибрация заняла больше времени, чем последовательная, поскольку потребовалось больше запусков миграционной модели. При последовательной калибрации первый этап занял примерно 30 минут. Второй этап занял также около 30 минут, поскольку требовалось подобрать значение только одного параметра, эффективной пористости. Совместная калибрация моделей завершилась через 2 часа 10 минут после запуска.

То есть в целом, совместная калибрация потребовала вдвое больше времени на выполнение, если учитывать непосредственно время работы программы для автоматической калибрации без участия человека. Тем не менее следует учитывать также и затраты на подготовку к запуску, которая требует значительно больше времени. Если же учесть полные затраты времени начиная с разработки модели и заканчивая калибрацией, разница времени выполнения оказывается гораздо менее значимой.

Успешность завершения определенного этапа калибрации контролируется сравнением «наблюденных» и модельных значений. На первом этапе сравниваются модельные и «наблюденные» уровни, на втором – концентрации. При совместной калибрации критерием завершения калибрации является минимизация целевой функции одновременно для двух наборов наблюдений. По этой причине при совместной калибрации отдельные этапы

выделить нельзя. В результате калибровки модели по двум методам получено два набора параметров. Значения параметров в этих наборах различаются. Для того, чтобы из двух вариантов выбрать тот, что лучше позволяет воспроизвести наблюдаемые процессы на разработанных моделях, необходимо сравнить расчетные и наблюдаемые величины. Несмотря на то, что при совместной калибровке моделей использовалась единая целевая функция, целесообразно отдельно сравнить результаты по уровням и отдельно результаты по концентрациям (Рисунок 3.8 и Рисунок 3.9). Сравнивались результаты первой попытки калибровки, без дополнительных уточнений. Начальные условия и настройки процесса калибровки были идентичны для двух вариантов. Разделение или объединение целевой функции для задач геофильтрации и геомиграции было единственным различием.

Как видно из этих рисунков, по уровням два сравниваемых подхода к калибровке дали одинаково хорошие результаты. Однако величины целевых функций заметно различаются для двух наборов параметров. Минимальное значение целевой функции по уровням для совместной калибровки составляет $S_{\text{Нсовм}} = 2.8 \cdot 10^5$. Тогда как для последовательной калибровки это значение составляет $S_{\text{Нпослед}} = 1.5 \cdot 10^6$.

При сравнении результатов моделирования миграции очевидно, что последовательная калибровка дала неверные результаты. На рисунке 3.9 приведено сравнение «наблюдаемых» и модельных концентраций для двух наборов параметров.

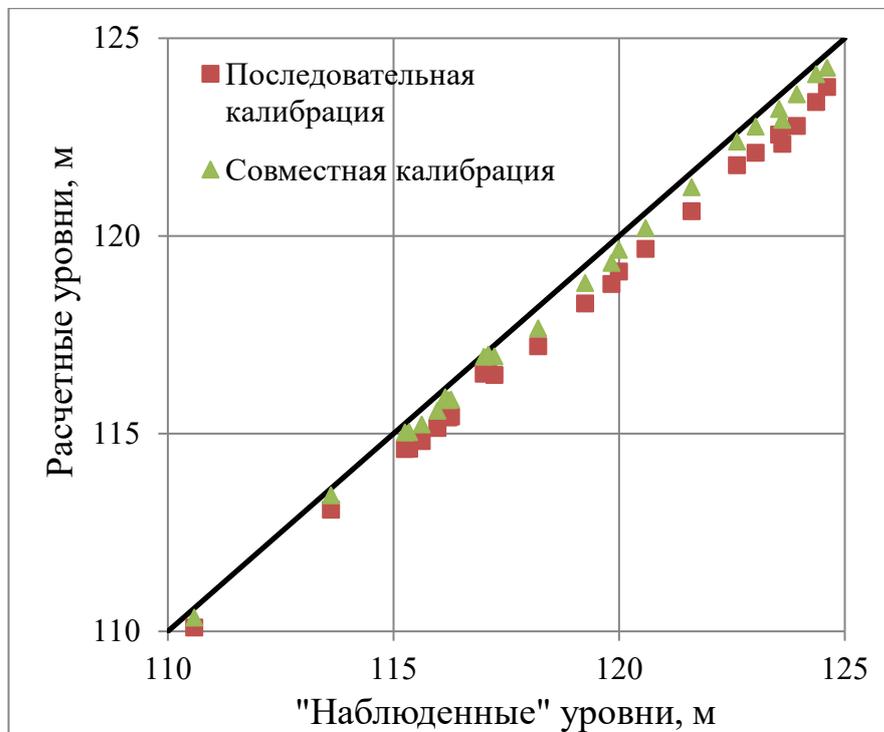


Рисунок 3.8. Сравнение модельных и наблюдаемых уровней подземных вод для двух вариантов калибровки.

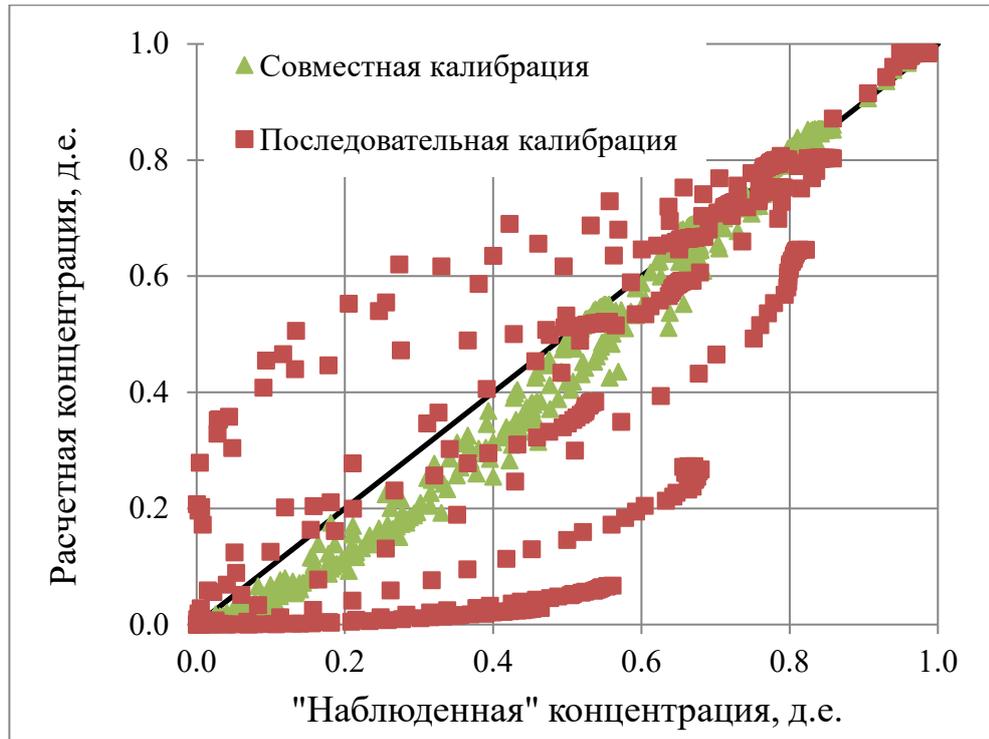


Рисунок 3.9. Сравнение модельных и наблюдаемых концентраций условного мигранта для двух вариантов калибровки.

При сопоставлении замеров концентраций в целом наглядно видно, что результаты совместной калибровки показывают значительно меньшие расхождения. Стоит сравнить полные графики изменения концентрации по скважинам. Выходные кривые приведены для уже показанных ранее скважин Р-3 и Е-126 (рисунки 3.10 и 3.11). На них видно, что при значениях параметров, полученных путем совместной калибровки, модельные выходные кривые почти повторяют «наблюдаемые». Стоит также сравнить целевые функции, рассчитанные только по концентрациям. Минимальное значение целевой функции по концентрациям для совместной калибровки составляет $S_{\text{совм}} = 3.3 \times 10^5$, для последовательной калибровки это значение составляет $S_{\text{послед}} = 5.5 \times 10^6$.

После завершения калибровки можно объединить две целевые функции в одну для оценки наборов параметров в целом. Для этого достаточно просто суммировать различные части целевой функции (2.11). Минимальное значение единой целевой функции составляет $S_{\text{совм}} = 6.1 \times 10^5$. Минимальное значение целевой функции, объединенной после завершения последовательной калибровки составляет $S_{\text{совм}} = 7 \times 10^6$. Такая значительная разница величин минимизированных целевых функций вкупе со сравнительными графиками «наблюдений» и расчетных величин позволяет однозначно заключить, что вариант значений параметров, полученный в результате совместной калибровки, лучше. Слово «лучше» в данном контексте означает, что этот набор значений параметров позволяет точнее отразить моделируемые процессы.

Необходимо понимать, что «лучший вариант» не означает точного определения реальных геофильтрационных параметров, поскольку значения параметров определялись в комплексе. Искусственность рассматриваемой задачи позволяет сопоставить полученные значения параметров с «истинными». После завершения калибровки тестовой модели автору для сравнения были предоставлены исходные значения всех параметров, они приведены в таблице 3.8.

Таблица 3.8. Сравнение откалиброванных значений параметров с «истинными».

Названия параметров, единицы измерения	Последовательная калибровка	Совместная калибровка	Исходные значения параметров
$K^1_{г}$ (м/сут)	0.09	0.07	0.10
$K^{34}_{г}$ (м/сут)	2.35	3.02	3.00
$K^2_{в}$ (м/сут)	4.0×10^{-3}	6.3×10^{-3}	5.0×10^{-3}
$K^{34}_{в}$ (м/сут)	0.14	0.09	0.1
W_3 (мм/год)	87	110	110
$W_В$ (мм/год)	130	150	145
$W_{ПОВ}$ (мм/год)	2400	3650	3650
$n_э$, д.е.	0.15	0.25	0.25

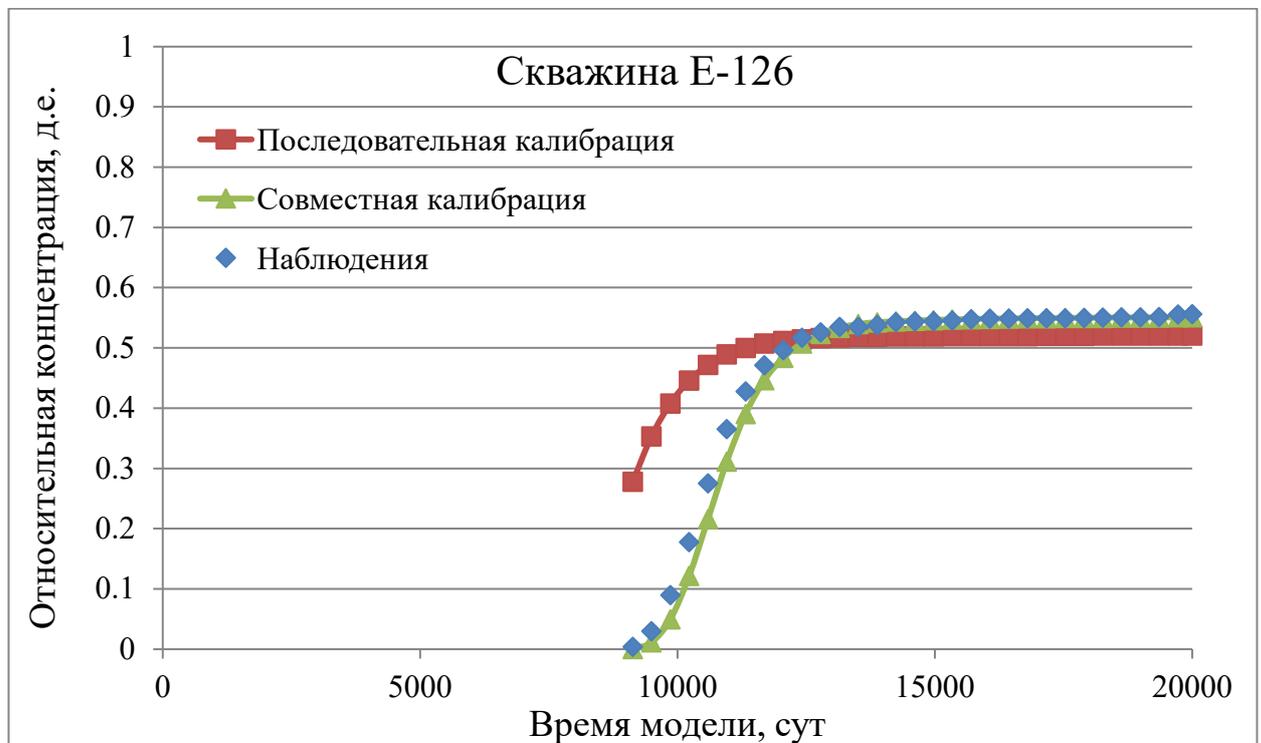


Рисунок 3.10. Выходные кривые мигранта по скважине E-126.

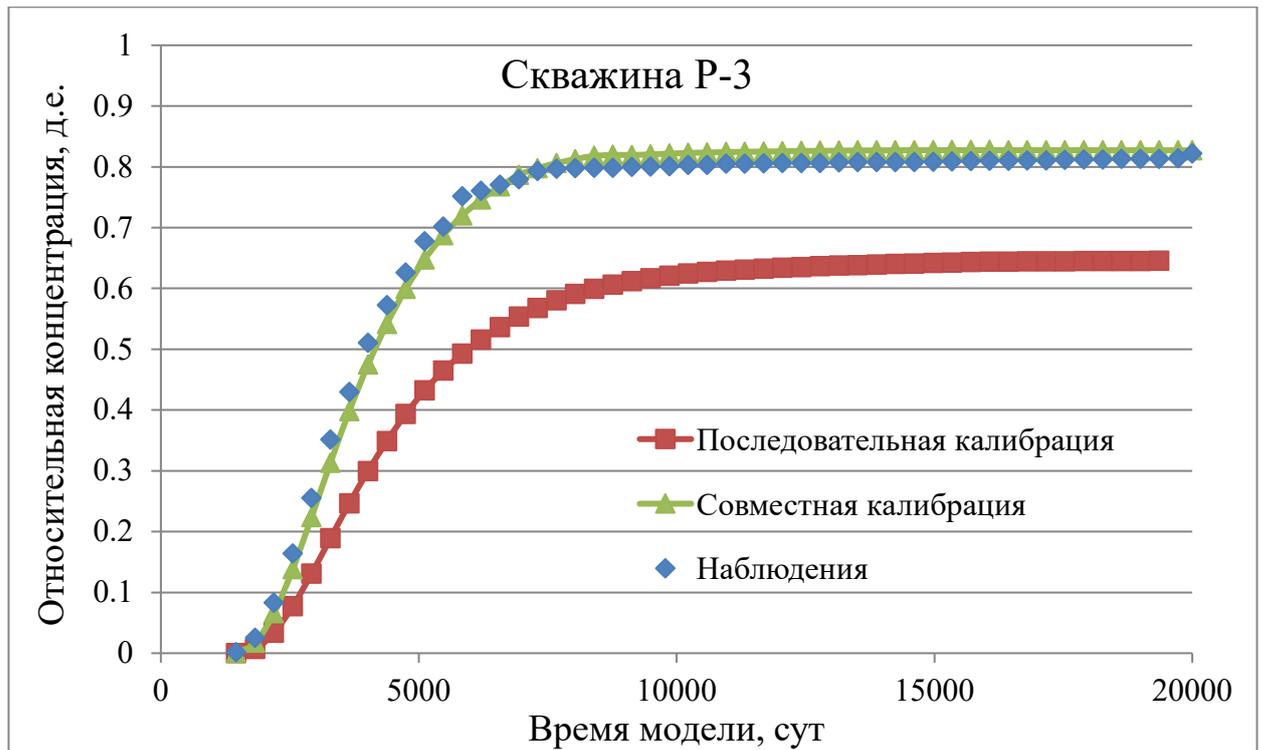


Рисунок 3.11. Выходные кривые мигранта по скважине Р-3.

3.2. Калибровка профиля проводимости в одномерном геофильтрационном и геомиграционном потоке

На первой тестовой задаче была оценена принципиальная возможность использования при калибровке совместно различных типов данных наблюдений, а также показана эффективность этого подхода в случае, когда конфигурация зон неоднородности калибруемых параметров известна априори.

Однако, при калибровке моделей реальных объектов зачастую априори неизвестны конфигурация и расположение зон неоднородности калибруемых параметров. Для калибровки модели в такой ситуации возможен подход, связанный с привлечением дополнительных данных, не являющихся наблюдениями, но характеризующих неоднородность восстанавливаемых в процессе калибровки параметров. На второй тестовой задаче оценивается возможность и эффективность регуляризации за счет использования дополнительных данных, не являющихся наблюдениями, при калибровке моделей.

3.2.1. Постановка второй тестовой задачи

Для разработки методики использовалась простейшая, одномерная задача. Она состоит в следующем. Существует одномерный изолированный напорный стационарный поток подземных вод в пласте протяженностью l , с переменной проводимостью, на границах

которого заданы постоянные напоры H_0 и H_1 . В некоторых точках этого потока расположены наблюдательные скважины, в которых измерены напоры подземных вод. Задача состоит в оценке распределения проводимости по длине. Исходя из постановки геофильтрационной задачи, при принятых граничных условиях, используя данные только о напорах подземных вод, поставленную задачу решить невозможно. Можно только лишь определить соотношение проводимостей на участках между наблюдательными скважинами, которое пропорционально соотношению градиентов на этих участках [50]. Для определения значений проводимости необходимо добавить еще один тип наблюдений. Добавим геомиграционный поток и наблюдения за миграцией нейтрального компонента подземных вод, запущенного в точке 0.

Тестовая модель состоит из 100 блоков длиной 10м каждый, общая длина потока $l = 1000$ м. Перепад напоров между двумя границами составляет 10м, $H_0 = 10$ м, $H_x = 0$ м. Мощность пласта m неизменна на всем его протяжении. Для тестовой модели в программном комплексе Processing Modflow [65] с использованием модуля генерации случайных полей создано неоднородное одномерное поле проводимости, имеющее логнормальное распределение с экспоненциальной пространственной корреляцией. Дисперсия натурального логарифма проводимости равна 5.06, а пространственный масштаб корреляции равен 0.1 от общей длины. Средний натуральный логарифм проводимости равен -3.5, что соответствует 0.03 м²/сут. Эффективная пористость однородна и принята равной 0.25.

Затем было смоделировано стационарное распределение напора при заданных граничных условиях с помощью Modflow, а также нестационарный перенос загрязнения с помощью MT3DMS. Задан перенос загрязнения от границы с большим напором и заданной единичной концентрацией до противоположной границы при условии, что начальная концентрация равна нулю во всей моделируемой области.

3.2.2. Калибрация модели

Калибрация второй тестовой модели также проводилась по схеме слепого эксперимента. Результаты моделирования были сохранены в качестве наблюдений, и при калибрации модели исходное распределение проводимости было неизвестно. Использовались уровни, сохраненные для пяти виртуальных скважин, и выходная кривая прохождения мигранта по одной скважине, расположенной в центре моделируемого профиля, скв. №3 (см. рисунок 3.12). Общее количество виртуальных замеров составляет $N_H = 5$ для уровней и $N_C = 35$ для концентраций. С этими исходными данными была начата работа по идентификации распределения проводимости по длине.

Калибрация выполнялась в несколько этапов. На первом этапе оценили эффективное значение проводимости, характеризующее пласт в целом. На втором этапе сравнивалось два

подхода к построению геофильтрационной неоднородности – заранее выделенные зоны и вариант метода пилотных точек. На третьем этапе к калибровке методом пилотных точек добавили регуляризацию для оценки ее влияния на итоговое распределение проводимости.

Как указано в разделе 1.1.2, значение эффективной проводимости можно вычислить теоретически как среднегармоническое [87]. Эффективное значение проводимости, рассчитанное этим методом, составило 3.24×10^{-2} м²/сут.

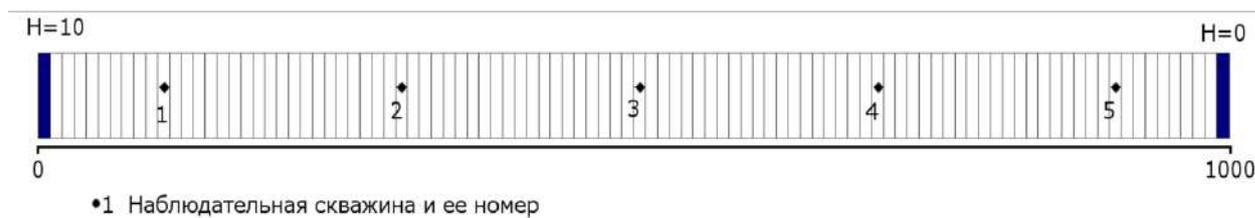


Рисунок 3.12. Схема модельной сетки с граничными условиями.

Также эффективное значение проводимости оценено путем калибровки модели. На всю модель задано единое значение проводимости, которое было единственным калибруемым параметром. Весовой коэффициент для уровней выбран аналогично описанному в разделе 3.1.4, также на основе выражения (2.5) и предпосылки равенства долей уровней и концентраций в целевой функции. Дисперсия замеров уровней также принята равной 1×10^{-4} м². Общее количество замеров равно 40, из них уровней – 5. Следовательно, для уровней весовой коэффициент равен $\omega_H = 0.5 \frac{40}{5 \times 10^{-4} \text{ м}^2} = 4 \times 10^4$ м⁻². Для концентраций

весовой коэффициент равен $\omega_C = 0.5 \frac{40}{35 \times 10^{-6}} = 5.7 \times 10^5$ д.е.

Откалиброванное значение проводимости составило 3.2×10^{-2} м²/сут, что несколько меньше теоретического значения, рассчитанного по зависимости (1.2). При этом модельная выходная кривая прохождения мигранта очень близка к эталонной, что показано на рисунке 3.13. Однако из графика сравнения модельных и наблюдаемых уровней очевидно, что схема однородного пласта не соответствует наблюдениям. При откалиброванном значении проводимости целевая функция составляет 5.5×10^5 , при этом сумма взвешенных невязок по концентрациям составляет только 572. Сумма взвешенных невязок по уровням на три порядка больше.

На втором этапе весь профиль был разбит на 6 зон с различными значениями проводимости. Как указано ранее, в такой постановке задачи можно определить только соотношение проводимостей на участках между наблюдательными скважинами. Поэтому, при

выделении зон их границы выбраны совпадающими с положением скважин. Соответственно, калибровалось 6 значений проводимости. В результате калибровки получилось хорошее совпадение, как по уровням, так и по концентрациям (Рисунок 3.14). Подобранные распределение проводимости на качественном уровне повторяет исходное (Рисунок 3.15). В этом случае значение целевой функции составило 1221, в частности 908 за счет уровней и 313 за счет концентраций. Итоговый вклад эти двух составляющих в целевую функцию сопоставим, результаты калибровки удовлетворительные, следовательно, пересмотра весовых коэффициентов для наблюдений не требуется.

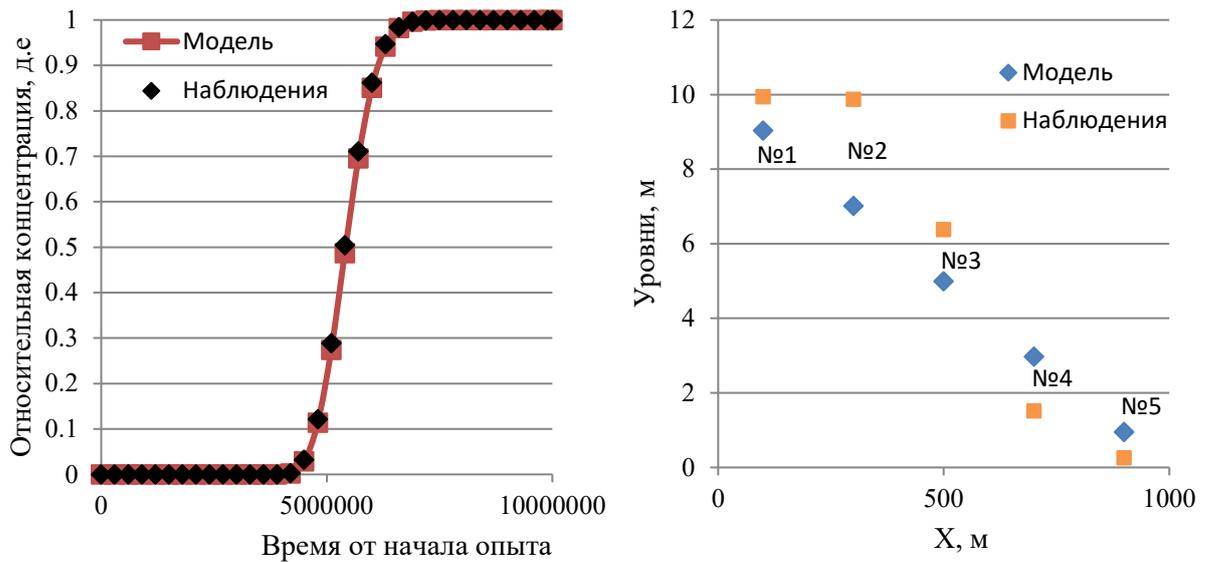


Рисунок 3.13. Сравнение модельных и наблюдаемых величин для модели однородного потока.

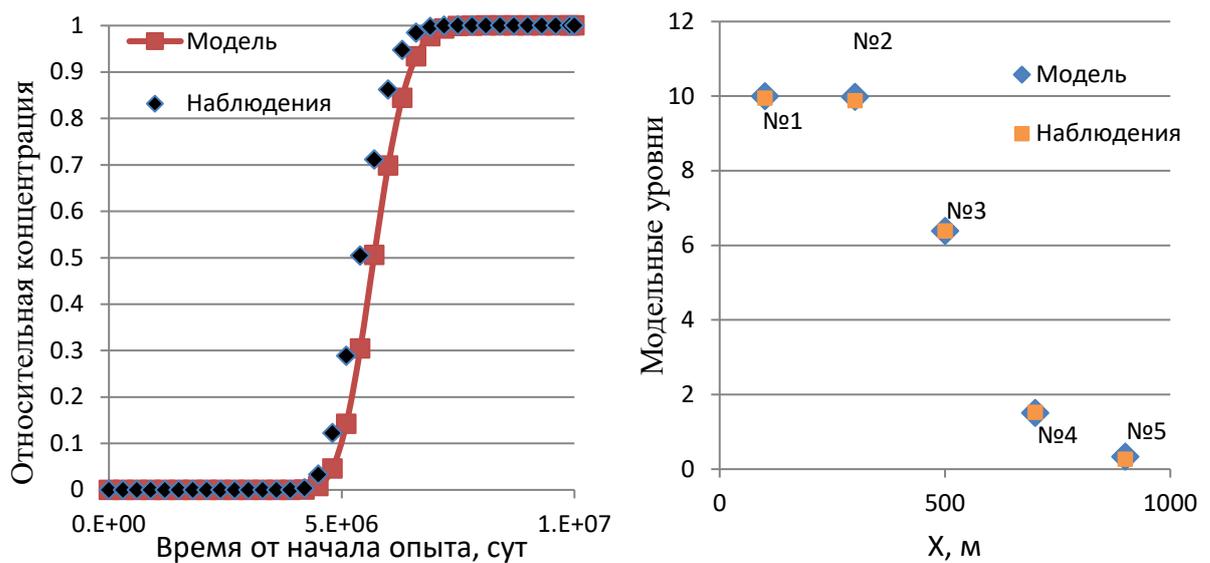


Рисунок 3.14. Сравнение модельных и наблюдаемых величин для модели неоднородного потока с 6-ю зонами различной проводимости.

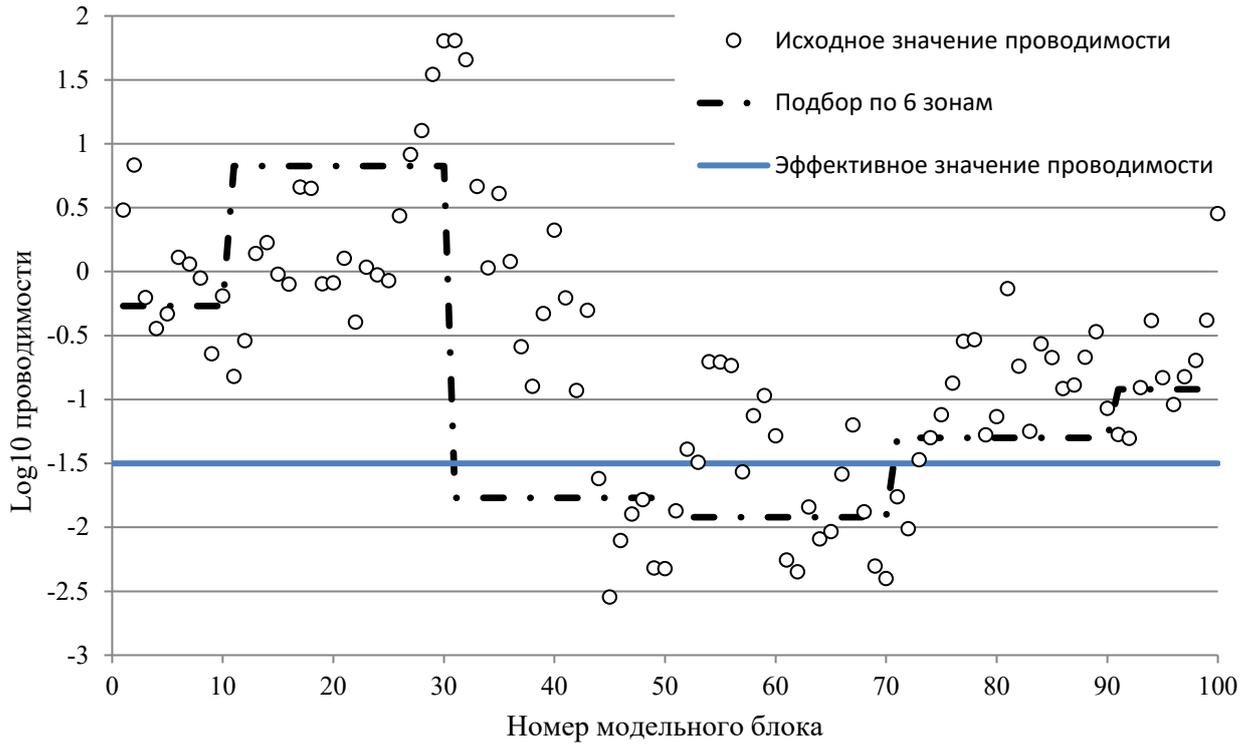


Рисунок 3.15. Сравнение подобранного поля проводимости с исходным распределением для схемы с 6 зонами неоднородности.

На третьем этапе была предпринята попытка откалибровать модель без априорного выделения зон неоднородности с помощью метода пилотных точек. Результаты калибровки с использованием этого метода зависят от положения и количества используемых пилотных точек [106]. Для данной модели метод пилотных точек был несколько изменен. Было выбрано максимально возможное количество точек – каждому модельному блоку был назначен свой параметр. В таком случае не требуется интерполяция для построения полного поля проводимости, что возможно благодаря небольшим размерам модельной сетки.

Однако при этом нарушается формальное условие корректности постановки задачи калибровки [73]: число параметров ($N_{PR} = 100$) больше числа наблюдений ($N_H + N_C = 40$). Для решения этой проблемы к наблюдениям была добавлена априорная информация, как описано в разделе 2.3.2. В качестве априорного значения принято эффективное значение проводимости, откалиброванное на первом этапе (3.2×10^{-2} м²/сут), и введено в целевую функцию согласно выражению (2.11). Учитывая широкий диапазон изменения проводимости, выбрано ее логарифмическое представление.

Вес, назначаемый априорной информации в данном случае, невозможно рассчитать по формуле (2.5), поскольку априорные величины не являются результатом каких-либо прямых измерений. Поэтому весовой коэффициент определяется эмпирически. Перепишем

выражение (2.11) для рассматриваемого случая. Как указано выше, вклад уровней в целевую функцию после завершения второго этапа калибровки составил 908, а вклад концентраций - 313. Добавляется 100 априорных значений проводимости:

$$S(b) = \frac{\sum_{i=1}^{N_H} \omega_H [H_i - H'_i(b)]^2}{(= 908)} + \frac{\sum_{i=1}^{N_C} \omega_C [C_i - C'_i(b)]^2}{(= 313)} + \frac{\sum_{k=1}^{N_{PR}} \omega_{PR} [\lg T_{PR} - \lg T'_k(b)]^2}{(=?)},$$

где ω_{PR} – неизвестный пока что весовой коэффициент априорных величин; $\lg T_{PR}$ – десятичный логарифм априорного значения проводимости; $\lg T'_k(b)$ – k -тое значение десятичного логарифма проводимости при текущем наборе параметров \mathbf{b} .

В разделе 2.3.2 приведена рекомендация, чтобы вклад регуляризаторов составлял небольшую долю (порядка 0.01-0.1) целевой функции. Согласно этой рекомендации, составляющая априорной информации $\sum_{k=1}^{100} \omega_{PR} [\lg T_{PR} - \lg T'_k(b)]^2$ не должна существенно превышать 10% от величины целевой функции или 121 на данный момент. На основании этого похода можно оценить величину весового коэффициента ω_{PR} . Для откалиброванного распределения проводимости, показанного на рисунке 3.15 пунктирной линией, сумма невязок логарифмов проводимости составит 132. Следовательно, величину весового коэффициента ω_{PR} можно принять равной единице.

При этих весовых коэффициентах заново выполнена калибровка, в результате которой значения проводимости по модельным блокам объединяются в несколько крупных зон, количество которых соответствует количеству наблюдательных скважин. Обозначим этот вариант целевой функции и полученные результаты как вариант №1.

Для иллюстрации влияния положения наблюдательных скважин на результаты калибровки сделано еще два варианта, с наблюдательными скважинами, смещенными влево и вправо. В Таблица 3.9 приведено положение виртуальных наблюдательных скважин в модельных блоках для трех вариантов калибровки. При изменении положения наблюдательных скважин, выделяемые зоны различной проводимости также смещаются (Рисунок 3.16). Как видно, при «неудачном» расположении наблюдательных скважин может быть упущена важная особенность водоносного горизонта. В данном случае это повышенное значение проводимости между модельными блоками №20 и №40. В варианте со смещением наблюдательных скважин вправо в откалиброванном распределении проводимости отсутствует ее повышение в указанном интервале.

Таблица 3.9. Положение виртуальных наблюдательных скважин в модельных блоках.

Номер скважины	Основное положение скважин	Смещение скважин влево	Смещение скважин вправо
1	Блок № 10	Блок № 10	Блок № 20
2	30	20	50
3	50	30	80
4	70	50	85
5	90	80	90

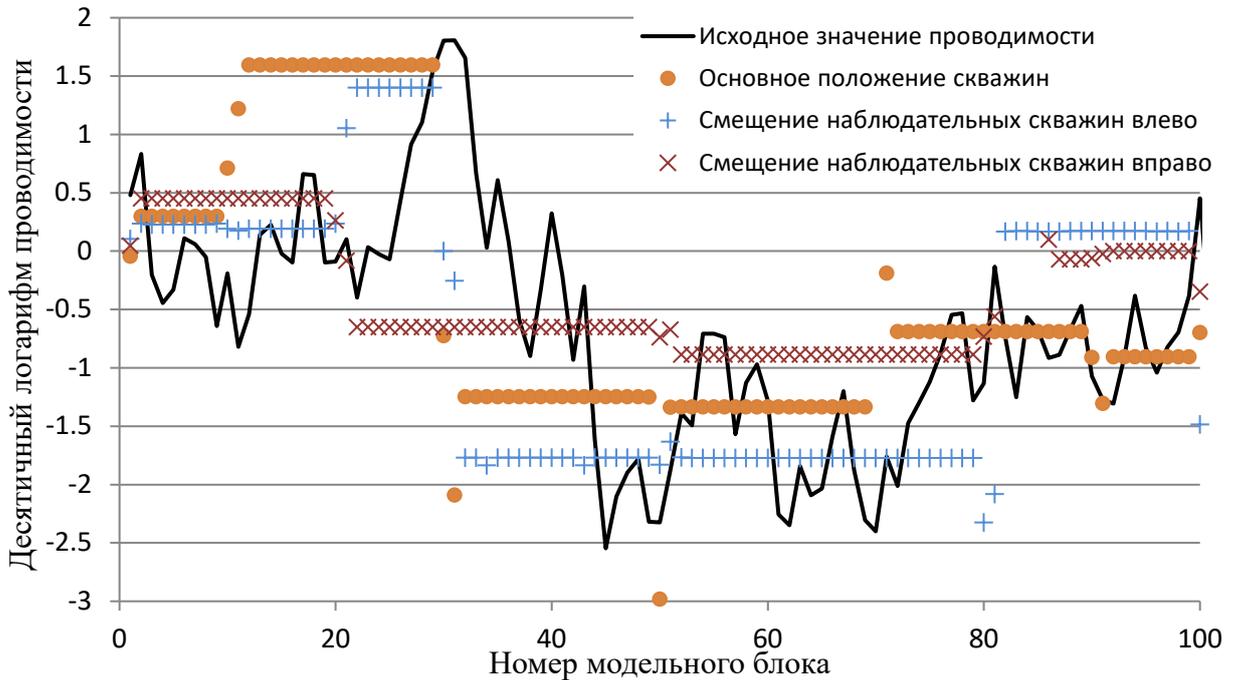


Рисунок 3.16. Иллюстрация зависимости выделяемых зон неоднородности от положения скважин.

Далее рассмотрим применение еще одного регуляризатора, предложенного в разделе 2.3.2. Это показатель гладкости, рассчитываемый согласно формуле (2.12), он добавляется как еще одно слагаемое к уже используемой целевой функции. На этом этапе калибровки она включает в себя наблюдения за напорами и концентрациями, невязку текущей и априорной проводимости и показатель гладкости. Целевая функция принимает вид:

$$S(\mathbf{b}) = \sum_{i=1}^{N_H} \omega_H [H_i - H'_i(\mathbf{b})]^2 + \sum_{i=1}^{N_C} \omega_C [C_i - C'_i(\mathbf{b})]^2 + \sum_{k=1}^{N_{PR}} \omega_{PR} [\lg T_{PR} - \lg T'_k(\mathbf{b})]^2 + \omega_A (A - A(\mathbf{b}))^2 \quad (3.1)$$

где A – целевая величина показателя гладкости; $A(\mathbf{b})$ – текущая величина показателя гладкости при наборе параметров (\mathbf{b}) ; ω_A – соответствующий весовой коэффициент. Весовой

коэффициент ω_A определяется аналогично таковому для априорной информации – на основе предпосылки о желаемой величине вклада регуляризаторов в целевую функцию не более 10%. Распределение проводимости, полученное в результате второго этапа калибровки (рисунок 3.15, пунктирная линия) состоит из 6 зон с 5 переходами. Величина показателя гладкости для этой ситуации равна 8.52 д.е. (см. таблицу 3.10), что приблизительно в 15 раз меньше, чем сумма невязок по априорной информации о проводимости (132 д.е.). Следовательно, для сохранения равных долей в целевой функции весовой коэффициент ω_A должен быть в 15 раз больше коэффициента ω_{PR} . Кроме того, теперь используется две регуляризующих составляющих вместо одной, и для сохранения общей доли в пределах 10% их весовые коэффициенты необходимо снизить вдвое. Таким образом, новый весовой коэффициент априорной информации ω_{PR} равен 0.5 д.е, и весовой коэффициент показателя гладкости равен 7.5 д.е.

Результаты выполнения калибровки с применением сглаживания показаны на рисунке 3.17. Как видно, это распределение проводимости уже качественно повторяет исходное распределение, однако в откалиброванном поле проводимости участок повышенных значений смещен по сравнению с исходным распределением. Даже с применением регуляризации построенное на основе имеющихся наблюдений поле проводимости нельзя признать успешным воспроизведением «истинного» поля проводимости, элементы неоднородности выявлены только в общих чертах. Обозначим этот вариант целевой функции и полученные результаты как вариант №2.

Таблица 3.10. К расчету показателя гладкости.

Номер модельного блока	Значение проводимости T		$\lg T_{i+1} - \lg T_i$	$(\lg T_{i+1} - \lg T_i)^2$
	Линейное, м ² /сут	$\lg T$		
10	0.54	-0.27	1.1	1.21
11	6.7	0.83		
30	6.7	0.83	-2.6	6.76
31	0.017	-1.77		
50	0.017	-1.77	-0.15	0.0225
51	0.012	-1.92		
70	0.012	-1.92	0.62	0.3844
71	0.05	-1.3		
90	0.05	-1.3	0.38	0.1444
91	0.12	-0.92		
Итоговое значение показателя гладкости				8.52

В то же время регуляризующие составляющие добавили к имеющимся наблюдениям новую информацию. Возможно, использование регуляризаторов позволит откалибровать рассматриваемую модель без использования наблюдений за концентрациями. Для проверки этого предположения использованная априорная информация была дополнена. Для всех пяти наблюдательных скважин были в качестве априорных установлены «истинные» значения проводимости в их модельных блоках вместо подобранного среднего. Таким образом, для 5 наблюдательных скважин в 5 модельных блоках известны значения проводимости. Эти значения приняты достоверными. Фактически, это соответствует определению проводимости в полевых условиях с помощью опытно-фильтрационных работ. В то же время не следует исключать априорную информацию, использованную для всех остальных блоков. Сохранение ненулевого веса априорных величин в остальных блоках должно снизить неопределенность подбираемой неоднородности, поскольку принимается неизвестным, участок какого размера в действительности характеризует каждая скважина. Веса выбраны таким образом, что параметры в 5 блоках с наблюдательными скважинами имеют такой же вес, что и параметры в остальных 95 блоках. Один весовой коэффициент ω_{PR} , равный 0.5 д.е., заменяется двумя весовыми коэффициентами, равными 5 и 0.26 д.е. Поскольку значения априорной проводимости с разными весовыми коэффициентами оказываются «перемешаны», их учет требует задания индивидуальных весовых коэффициентов для каждого значения. С учетом исключения концентраций целевая функция принимает следующий вид:

$$S(\mathbf{b}) = \sum_{i=1}^{N_H} \omega_H [H_i - H'_i(\mathbf{b})]^2 + \sum_{k=1}^{N_{PR}} \omega_{PRk} [\lg T_{PRk} - \lg T'_k(\mathbf{b})]^2 + \omega_A (A - A(\mathbf{b}))^2 \quad (3.2)$$

Результаты выполнения калибрации с добавлением «истинных» значений проводимости также показаны на рисунке 3.17. Обозначим этот вариант целевой функции и полученные результаты как вариант №3. Этот вариант калибрации позволил воспроизвести поле проводимости наиболее близко к исходному. В то же время миграционный расчет на откалиброванной модели показывает запаздывание фронта вытеснения (см. рисунок 3.18). Таким образом, на тестовой модели показано, что качественно более похожее на «истинное» поле проводимости не обеспечивает более правильный результат расчета. Кроме того, можно заключить, что для построения корректной модели наблюдения за концентрациями оказываются важнее, чем прямые измерения параметров.

Расчетные напоры для всех трех вариантов близки к использованным наблюдениям. Средняя невязка напоров для каждого из трех вариантов не превышает 0.04 м (при общем перепаде напоров в пределах модели 10 м).



Рисунок 3.17. Результаты применения сглаживания.

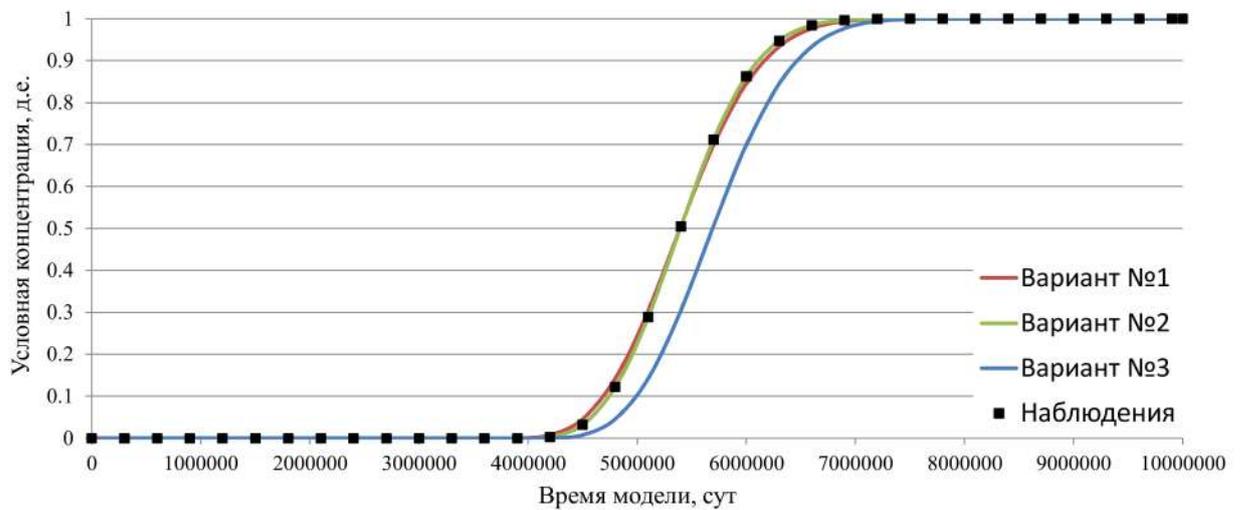


Рисунок 3.18. Сравнение результатов калибровки при использовании регуляризации.

3.3. Выводы по главе 3

В результате проведенных в данной главе исследований на примере двух синтетических тестовых примеров показано, что принятая в настоящей работе рабочая гипотеза: совместная калибровка моделей при одновременном использовании данных различных типов и моделей различных процессов может быть эффективнее последовательной калибровки является справедливой. По результатам проведенных методических исследований можно сделать следующие выводы:

1. Для первой рассмотренной тестовой задачи совместная калибровка позволила получить приемлемый набор значений параметров, который позволил точно воспроизвести наблюдения за уровнями и концентрациями. При прямом сравнении исходных значений параметров с откалиброванными оказалось, что подобранные значения параметров очень близки к «истинным». Последовательная калибровка с отдельным рассмотрением моделей геофильтрации и геомиграции не позволяет воспроизвести наблюдения за концентрациями.

2. Для второй тестовой задачи метод совместной калибровки геофильтрационной и геомиграционной модели в условиях, когда активная пористость пласта известна, позволил получить распределение величин проводимости потока, а не их соотношений по длине, даже в случае, когда отсутствуют данные об измеренном расходе. Основываясь только на наблюдениях за уровнями и концентрациями, можно на качественном уровне определить пространственную неоднородность водоносного горизонта. При этом следует иметь в виду, что конфигурация оцениваемых зон неоднородности зависит от расположения наблюдательных скважин.

3. Показано, что без учета наблюдений за концентрациями откалиброванная модель дает неверный миграционный прогноз. Это подтверждает, что регуляризация (в данном случае – за счет введения «истинных» значений проводимости в модельных блоках со скважинами), решая проблему неединственности решения не обеспечивает его «правильности».

4. Классический подход последовательной калибровки геофильтрационной и геомиграционной моделей не позволил подобрать удовлетворительный набор значений параметров. Таким образом, можно заключить, что совместная калибровка всех используемых моделей позволяет более эффективно использовать данные наблюдений и оптимизировать процесс разработки моделей.

Глава 4. Применение многомодельной совместной калибровки для переоценки запасов подземных вод на участке водозабора ВПС-4 (г. Воронеж)

Целью настоящего раздела является выявление и анализ особенностей совместной калибровки применительно к разномасштабными моделям, описывающим один гидрогеологический процесс. В качестве типичной и достаточно актуальной практической проблемы, для которой может быть применен подобный подход, может рассматриваться переоценка запасов подземных вод на участках действующих водозаборов. При проведении переоценки приходится рассматривать и материалы разведочных работ, и материалы объектного мониторинга в процессе эксплуатации. Это может привести к разработке нескольких моделей геофильтрации разных пространственно-временных масштабов, каждая из которых должна быть так или иначе откалибрована. Поэтому целесообразно рассматривать возможность совместной калибровки этих моделей.

Для иллюстрации возможностей методов совместной калибровки в подобных условиях был выбран участок водозабора ВПС-4 г. Воронежа, на котором автор занимался разработкой геофильтрационной модели для переоценки запасов подземных вод, для чего было необходимо уточнить геофильтрационную схему и параметры, обработав результаты различных опытно-фильтрационных опробований и режимных наблюдений в период эксплуатации.

4.1. Описание объекта

Воронеж – это крупный город, население которого на 2013 год достигло 1 миллиона. Общее водопотребление составляет 500 тыс. м³/сут [16]. Водоснабжение города осуществляется за счет нескольких водозаборов подземных вод, расположенных вокруг города. Большая часть водозаборов - берегового типа, они расположены на берегах Воронежского водохранилища (Рисунок 4.1), приток из которого обеспечивает большую часть водоотбора. Рассматриваемый район находится в пределах Окско-Донской низменности, и расположен на водораздельных пространствах рек Дон-Воронеж и Воронеж-Усманка.

Единственным эксплуатируемым водоносным комплексом в районе расположения Воронежских водозаборов, является неоген-четвертичный (N-Q). Он включает в себя следующие отложения: современные аллювиальные (a_{IV}), средне-верхнечетвертичные аллювиальные (a_{II-III}) и плиоценовый терригенный комплекс (N_2).

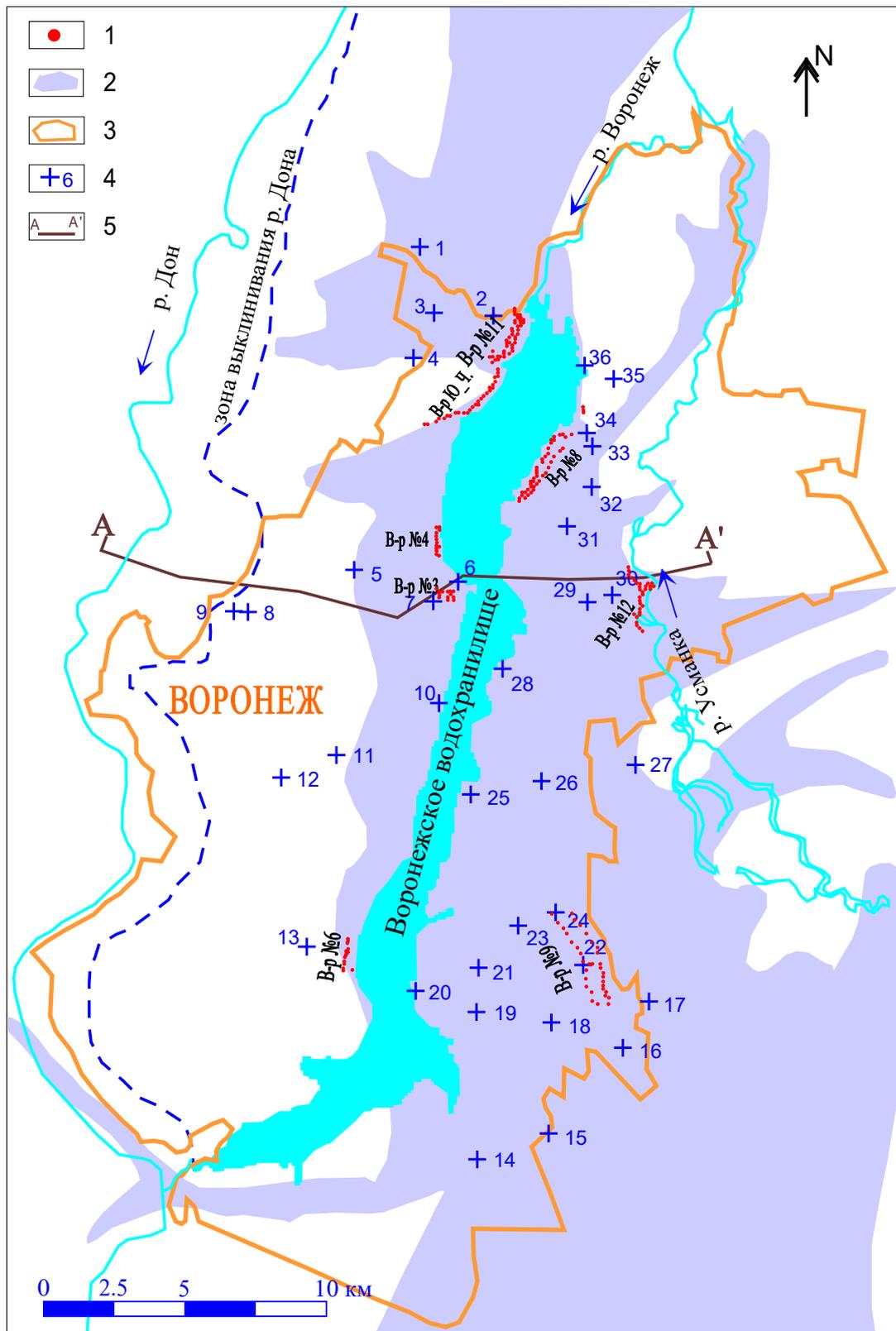


Рисунок 4.1. Схема размещения водозаборов и наблюдательных скважин г. Воронежа, приводится по отчету [155]. Обозначения: 1 – водозаборная скважина; 2 – зона палеодолины р. Дон; 3 – административная граница г. Воронежа; 4 – наблюдательная скважина и её номер; 5 – линия гидрогеологического разреза.

Основная часть водоносного комплекса сложена неогеновыми терригенными отложениями, представленными разнозернистыми песками, более грубыми в основании, мощностью 26 - 40 м. Они перекрываются аллювиальными четвертичными отложениями, представленными песками, супесями и суглинками мощностью 8-20 м. В подошве комплекса залегают водоупорная терригенная толща глин с прослоями известняков (верхнесемилукская свита D_{3sm_2}) и слабОВОдоносный карбонатный комплекс трещиноватых известняков с прослоями глин (саргаевская и нижнесемилукская свиты D_{3sr-sm_2}) (Рисунок 4.3). Неоген-четвертичный водоносный комплекс – безнапорный, первый от поверхности. Геофильтрационный поток формируется за счет инфильтрационного питания в пределах рассматриваемой территории, разгружается в реки Дон и Воронеж (Воронежское водохранилище). Существенную долю в балансе подземных вод составляют водозаборы.

Большинство водозаборов подземных вод, используемых для водоснабжения Воронежа – берегового типа. Для выяснения условий формирования режима подземных вод рассматриваемого района на кафедре гидрогеологии геологического факультета МГУ в инициативном порядке была разработана региональная геофильтрационная модель. Эта региональная модель охватывает участок междуречья Дон – Воронеж – Усманка (Рисунок 4.2) и учитывает естественные гидродинамические границы потока подземных вод. Подробно она описана в диссертации Ван Пина [5], посвященной береговым водозаборам. Здесь приводится ее краткая характеристика. Модель стационарная, однослойная, моделирует неоген-четвертичный водоносный комплекс. Границы показаны на рисунке 4.2. В качестве параметра проницаемости использована проводимость, мощность водоносного комплекса не учитывается.

Масштаб данной модели не позволяет корректно оценить понижение уровней в отдельных водозаборных скважинах и учесть локальную фильтрационную неоднородность. На ней были оценены зоны влияния водозаборов г. Воронежа, структура их водоотбора и значения основных геофильтрационных параметров. К данной региональной модели обращались при последующей разработке локальных геофильтрационных моделей, охватывающих участки отдельных водозаборов.

На региональной модели показано [5], что в балансе береговых водозаборов до 90% водоотбора обеспечивает приток из водохранилища. Рассмотрим один из них, водозабор ВПС-4. Кроме него вблизи берегов Воронежского водохранилища расположено еще 5 водозаборов, имеющих сходную схему. Таким образом, рассматриваемые на примере ВПС-4 проблемы актуальны для ряда аналогичных объектов даже в пределах одного города.

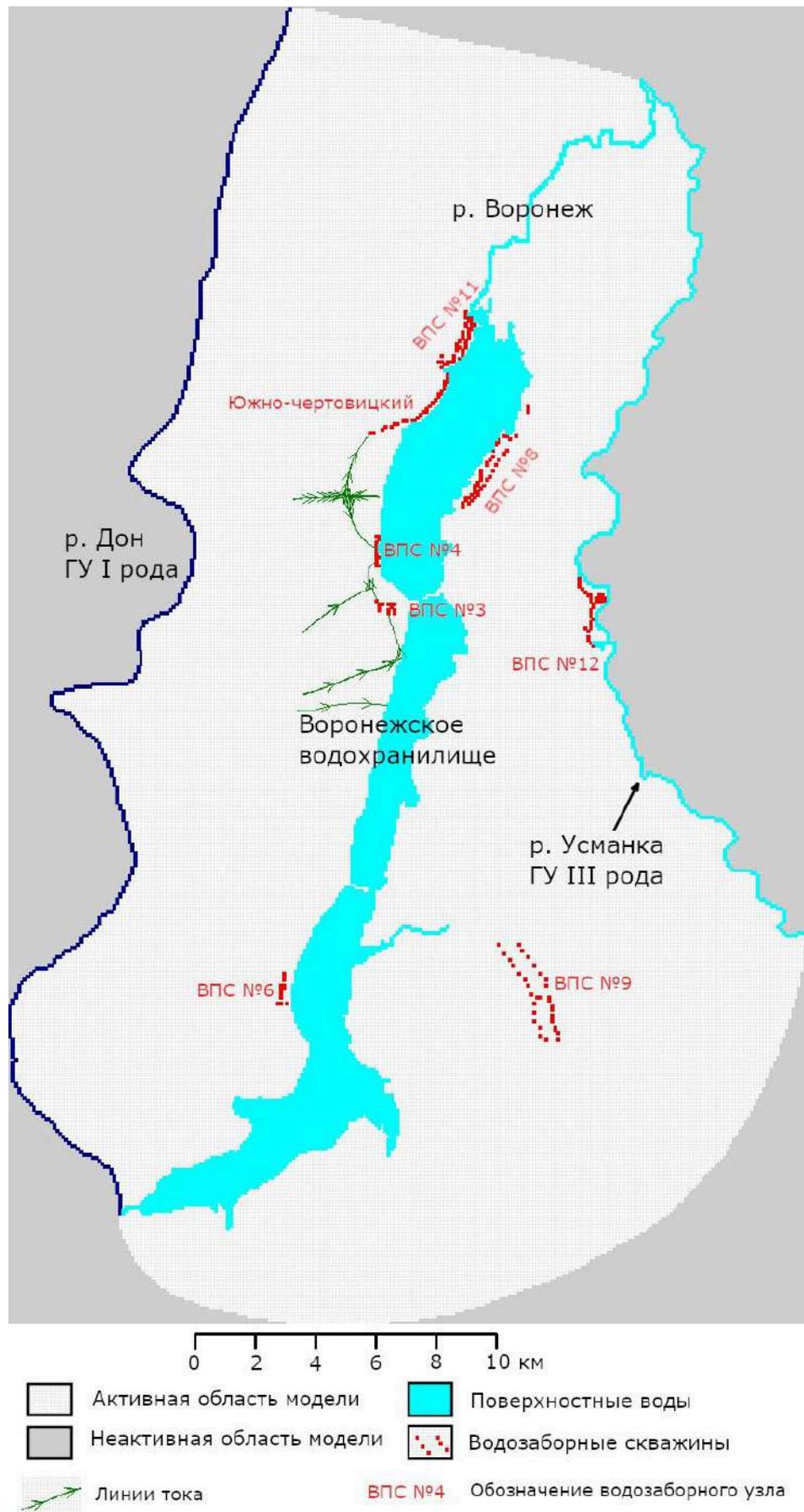


Рисунок 4.2. Схема региональной модели.

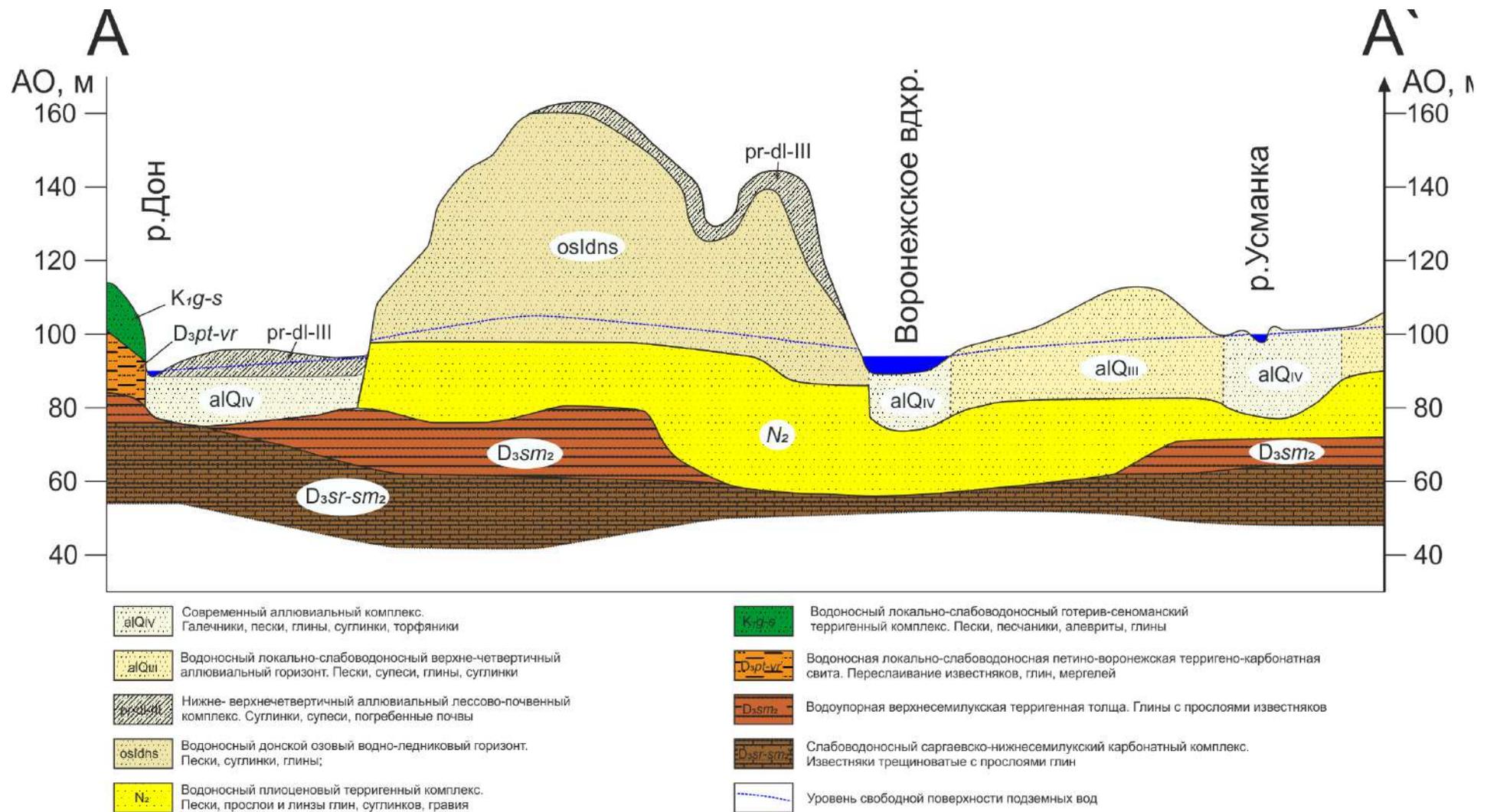


Рисунок 4.3. Гидрогеологический разрез по линии А-А'. Воспроизведен по отчету [155].

Рассмотрим более подробно историю эксплуатации объекта. Все фазы развития ВПС-4 подробно перечислены в диссертации Е.С. Казак [21]. За все время эксплуатации схема водозабора изменялась четыре раза. Первая схема водозабора существовала до 1960 г. Он представлял собой сифонный пойменный водозабор, линейный ряд до 21 скважины на берегу р. Воронеж, на расстоянии 10 – 70 м от берега. В паводковые периоды участок расположения скважин затапливался водой. Скважины были объединены сифонной линией, по которой вода забирается насосами станции первого подъема. Вторая схема водозабора существовала в 1960-1968 г. Водозабор состоял из совершенных скважин на неоген-четвертичный водоносный комплекс, с эксплуатацией погружными насосами. Данный подход позволил увеличить мощность водозабора. В 1966 году была проведена реконструкция водозабора в связи с созданием Воронежского водохранилища. Эксплуатационные скважины были перенесены на высокий правый берег у основания склона террасы реки. Третья схема водозабора - береговой створ скважин, который сооружался с 1968 по 1970 годы. Четвертая схема водозабора была принята в связи с необходимостью повышения производительности водозабора. Она включала в себя создание намывной площадки в пределах акватории водохранилища. Специалисты ООО «Воронежгеология» предложили вариант его реконструкции путем организации нового водозабора на намывной дамбе (острове) длиной 1500 м, расположенной напротив действующего водозабора ВПС-4. Суммарная производительность водозабора должна возрасти за счет питания водоносного горизонта с двух сторон. В 1996-1998 г. была намыта площадка под расширение водозабора, и в 1998 г. на ней были проведены гидрогеологические изыскания. В их составе была проведена кустовая откачка длительностью один месяц, постановка и интерпретация которой описана в статье [6]. Бурение нового створа водозаборных скважин на намывной площадке начато с 1998 г. По состоянию на конец 2011 года на дамбе уже работало 13 эксплуатационных скважин (Рисунок 4.4). Для обоснования расширения водозабора на северную часть дамбы в 2011 году была проведена еще одна кустовая откачка.

Известно, что грунт для намывки искусственного острова брали из дна водохранилища, но никаких точных данных о месте отбора и объеме перенесенного грунта не было. Поэтому в 2011 году сотрудники и студенты кафедры гидрогеологии геологического факультета МГУ провели полевое обследование акватории Воронежского водохранилища, прилегающей к ВПС-4, в том числе батиметрическую съемку. Результатом стало картирование карьера в дне водохранилища, являвшегося источником грунта для намывки острова. На карте глубин водохранилища (Рисунок 4.5) показаны размер и глубина карьера. Карта выполнена по результатам полевых работ [157].

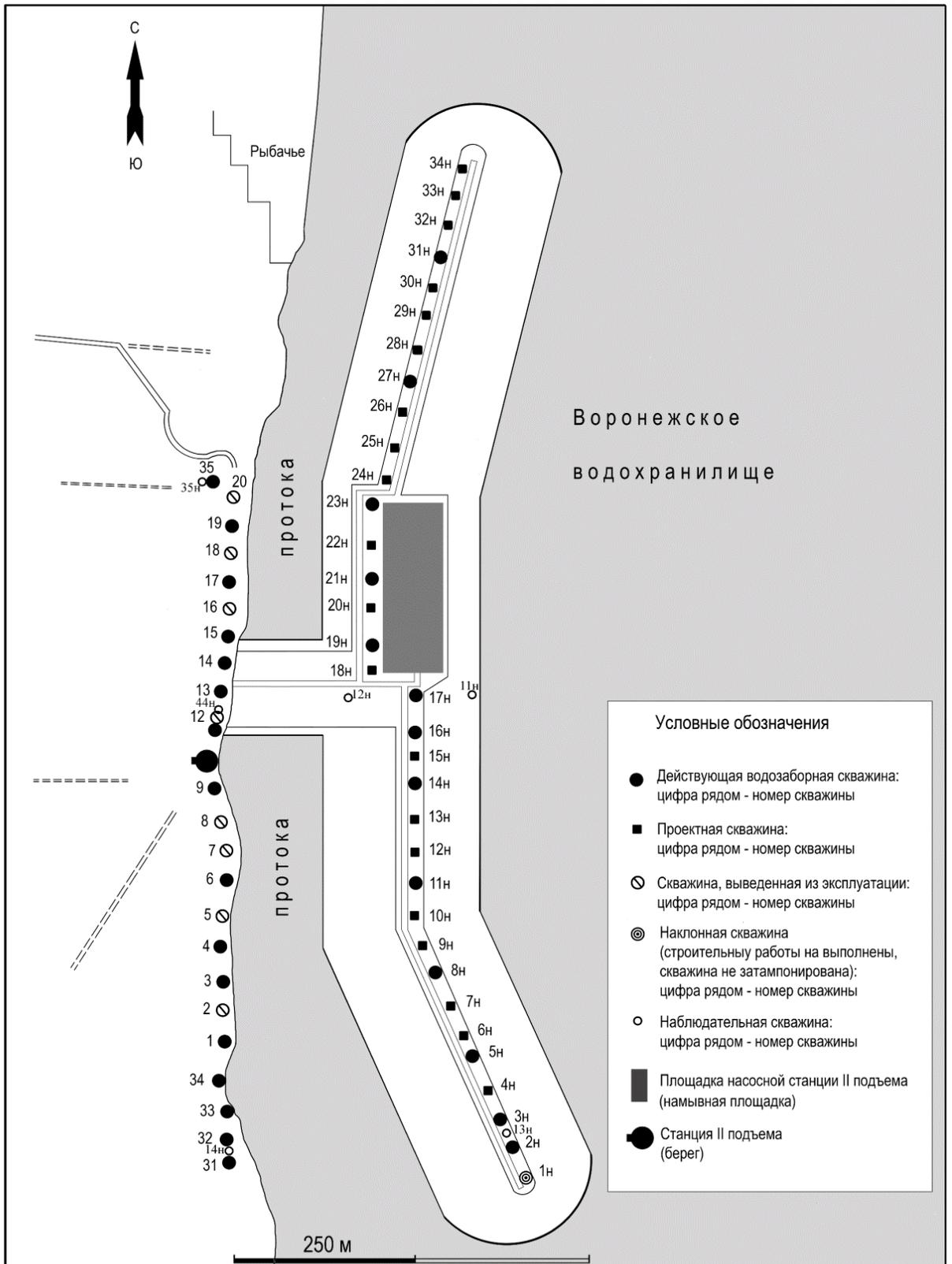


Рисунок 4.4. Схема ВПС-4 по состоянию на 2011 год.

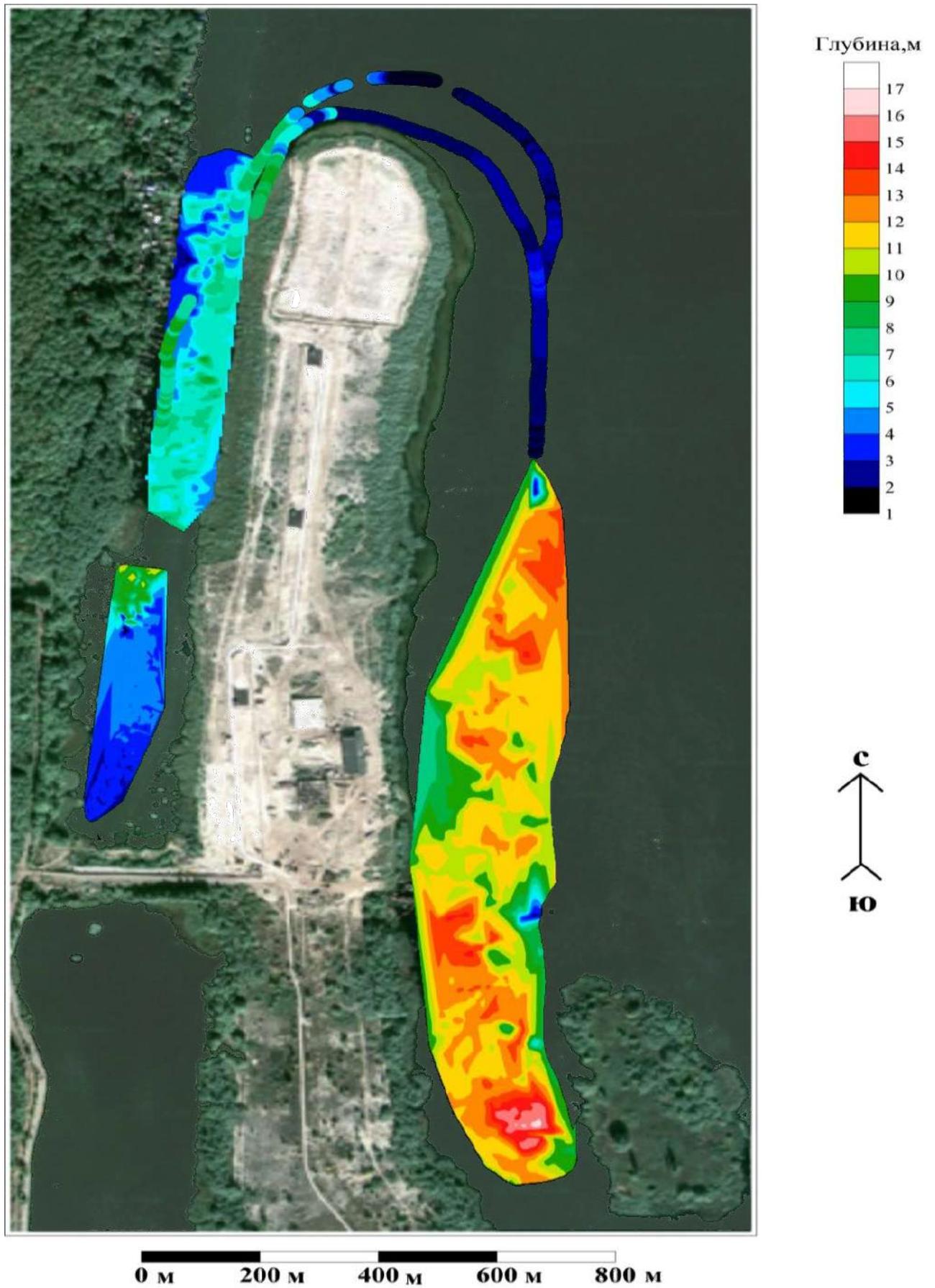


Рисунок 4.5. Батиметрическая карта северной части акватории намывной площадки.

4.2. Обоснование и калибровка геофильтрационной модели для переоценки запасов водозабора ВПС 4

Опробованная методика совместной калибровки была применена при разработке модели водозабора ВПС-4 г. Воронежа. На участке этого водозабора требовалось провести переоценку запасов подземных вод, для чего было необходимо уточнить геофильтрационную схему и параметры, обработав результаты различных опытно-фильтрационных опробований и наблюдений. Водозабор ВПС-4 расположен к северу от Воронежа, на западном берегу Воронежского водохранилища. В 1998 году была проведена первая длительная опытная кустовая откачка, в 2011 году была проведена вторая. Также на ВПС-4 ведутся режимные наблюдения за уровнями подземных вод, данные которых необходимо учитывать при переоценке запасов. Учитывая сложность современной береговой линии водохранилища, было принято решение о необходимости использования математического моделирования.

Важнейшим фактором, определяющим максимально возможный водоотбор, является взаимосвязь подземных и поверхностных вод, которую можно охарактеризовать с помощью параметра A_0 . Для единого слоя донных отложений параметр определяется как $A_0 = m_0/k_0$, где m_0 - мощность слабопроницаемых отложений, а k_0 - их коэффициент фильтрации. Величина параметра A_0 на территории ВПС-4 была оценена по результатам двух упомянутых выше опытных кустовых откачек, проведенных в пределах водозабора на фоне его эксплуатации. Центральные скважины опытных откачек расположены на расстоянии менее километра друг от друга. При этом величины указанного параметра A_0 , полученные по двум опытам, отличаются более чем в 3 раза. Такая неопределенность важнейшего для берегового водозабора параметра требует дальнейшего изучения. Без выяснения причины, приведшей к столь различным результатам обработки сходных опытов, невозможно построить достоверную прогнозную модель, необходимую для проведения переоценки запасов подземных вод на участке водозабора ВПС-4.

Также следует отметить, что на участке ВПС-4 в верхней части разреза выделяется прослой суглинков (Рисунок 4.8). Взаимодействие подземных и поверхностных вод затруднено не только за счет донных отложений водохранилища, но и за счет этого прослоя суглинков. Нет необходимости разделять общее фильтрационное сопротивление, существующее между водохранилищем и неоген-четвертичным водоносным горизонтом, и отдельно оценивать сопротивление собственно донных отложений. Таким образом, для условий ВПС-4 параметр A_0 можно использовать в качестве обобщенной характеристики фильтрационного сопротивления между подземными и поверхностными водами.



Рисунок 4.6. Схема искусственного острова и расположение опытных скважин.

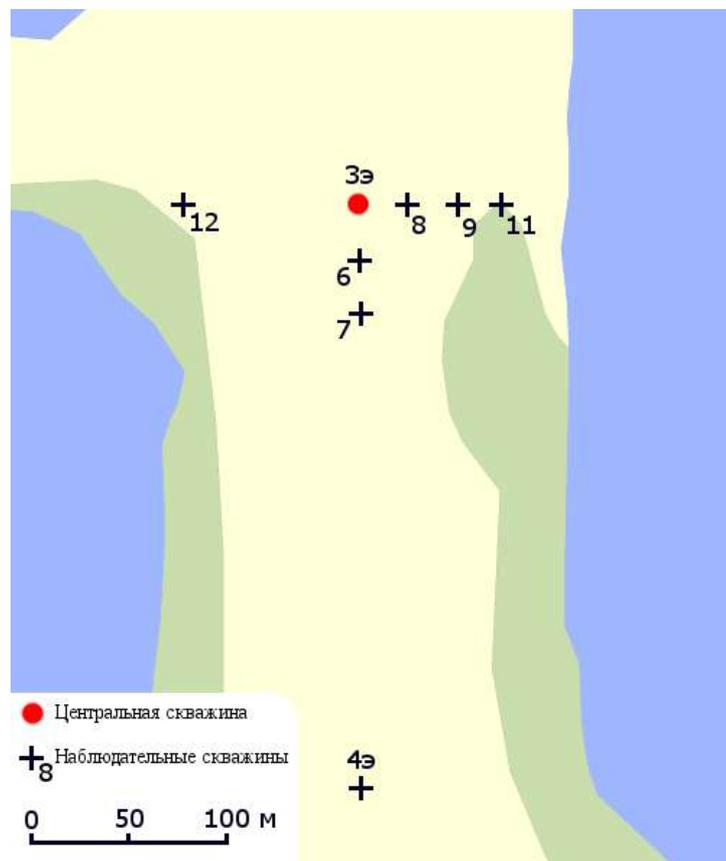


Рисунок 4.7. Схема расположения скважин опытной откачки в 1998 г.

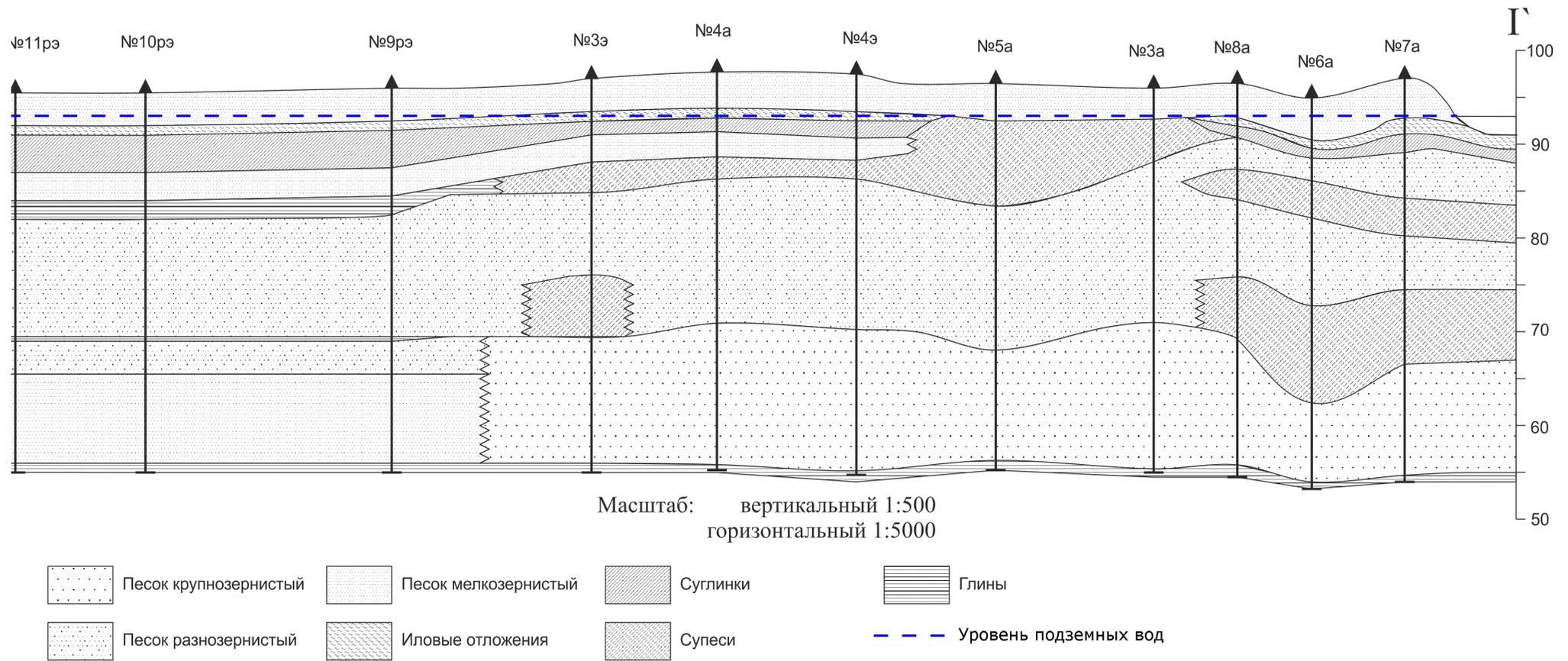


Рисунок 4.8. Разрез по линии I-Γ (по рисунку 4.6).

4.2.1. *Опытно-фильтрационные работы*

Начиная с 20 октября 1998 г. с целью определения параметров эксплуатируемого водоносного горизонта из скважины 3э в течение 30 суток проводилась опытная кустовая откачка. Скважина 3э расположена в центральной части искусственного острова (Рисунок 4.6). За время проведения откачки существенно (до 0.3 м) изменялся уровень водохранилища. В связи с этим производились замеры уровня водохранилища с интервалом от 4 до 24 часов. Наблюдения за снижением уровней подземных вод производились в центральной скважине и 7 наблюдательных (Рисунок 4.7). Необходимо отметить, что в 1998 г. скважин было сравнительно немного, и нумерация наблюдательных скважин не соответствует схеме на 2011 г. (Рисунок 4.4). В течение первых двух суток интервал измерений увеличивался от 1 минуты до 2 часов. После интервал произведения замеров не изменялся и составлял 4 часа для всех скважин. Дебит откачки контролировался и составлял $4320 \text{ м}^3/\text{сут}$.

Проводимость неоген-четвертичного водоносного горизонта при обработке результатов откачки графоаналитическими методами оценена в диапазоне $2000 - 2300 \text{ м}^2/\text{сут}$, что при мощности 30 м соответствует коэффициенту фильтрации песков $67 - 77 \text{ м}/\text{сут}$. Характеристика сопротивления ложа водоема A_0 оценена в диапазоне от 90 до 190 сут, что при мощности слабопроницаемого слоя 9 м соответствует $0.047 - 0.1 \text{ м}/\text{сут}$.

Вторая опытная кустовая откачка была проведена в марте – апреле 2011 года из скважины 31н. В ее постановке и проведении принимали непосредственное участие сотрудники кафедры гидрогеологии геологического факультета МГУ, в том числе автор данной работы. Откачка была начата 15 марта 2011 г., ее продолжительность составила 30 суток. На начало проведения откачки поверхность земли находилась в промерзшем состоянии, и снеготаяние еще не началось. Таким образом, на начальном этапе откачки инфильтрационное питание отсутствовало. Уровень водохранилища также не изменялся. Период восстановления уровней (с 14 апреля 2011 г.) пришелся на период активного снеготаяния. В период восстановления уровень водохранилища измерялся недостаточно регулярно. Изменение уровня водохранилища (до 0.3 м в 1998 г.) может существенно исказить ход восстановления, поэтому восстановление уровней не обрабатывалось.

Центральная скважина расположена в северной половине острова, на участке, предусмотренном для расширения водозабора (Рисунок 4.6). Вблизи нее находятся уже действующие водозаборные скважины. Куст наблюдательных скважин состоял из 2 лучей. Один луч направлен параллельно берегам острова, другой луч расположен между центральной скважиной и ближайшим берегом. Первые трое суток для замеров уровней использовались автономные датчики давления с логгерами марки «Solinst Levelogger», благодаря чему

интервал измерений составлял 10 секунд. После интервал измерений составлял 4 часа. Поскольку откачка проводится весной, отдельное внимание уделялось замерам изменения уровня водохранилища. В течение всей откачки уровень водохранилища оставался постоянным при точности измерений 1 см. Дебит откачки также контролировался и оставался в пределах от 4970 до 5064 м³/сутки. При обработке дебит откачки принят равным 5000 м³/сутки.

Проводимость неоген-четвертичного водоносного горизонта при обработке результатов откачки графоаналитическими методами оценена в диапазоне 1500 – 1900 м²/сут, что при мощности 27 м соответствует коэффициенту фильтрации песков 56 – 70 м/сут. Характеристика сопротивления ложа водоема A_0 оценена в диапазоне от 104 до 334 сут, что при мощности слабопроницаемого слоя 9 м соответствует 0.027 – 0.086 м/сут.

Помимо опытных кустовых откачек на водозаборе ВПС-4 ведутся режимные наблюдения за уровнями эксплуатируемого водоносного горизонта. В распоряжении автора были замеры за 2007-2011 г. по шести наблюдательным скважинам.

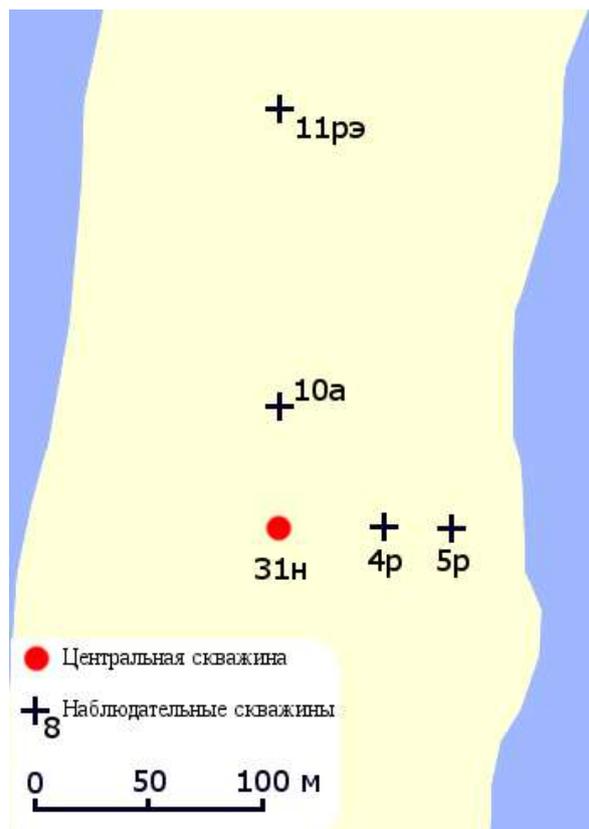


Рисунок 4.9. Схема расположения скважин опытной откачки в 2011 г.

4.2.2. Построение математической геофильтрационной модели

Для оценки геофильтрационных параметров была разработана численная модель участка ВПС-4. Как указано выше, она основывается на более ранней региональной модели междуречья Дон – Воронеж – Усманка.

Основной проблемой при разработке модели является отсутствие информации о геологическом разрезе за пределами водозабора. Ввиду отсутствия данных о мощности слоев за пределами водозабора приняты постоянными и соответствуют средним мощностям, известным по скважинам на водозаборе. На модели воспроизводились проведенные в 1998 и 2011 годах кустовые откачки подземных вод. Расчеты велись в понижениях, калибрация модели, соответственно проводилась на основании замеров понижений уровней подземных вод, выполненных в течение указанных опытно-фильтрационных работ.

Режим во времени. Моделируется нестационарный поток подземных вод, что необходимо для воспроизведения хода откачек.

Структура. Геологический разрез схематизирован 3 модельными слоями. На рисунке 4.10 цветом показано выделение модельных слоев. Первый модельный слой соответствует первому от поверхности слою песков, залегающему выше слоя суглинков. Также в первый модельный слой задано водохранилище. Большая часть первого слоя осушена, поэтому нет необходимости учитывать его истинную мощность в модели. Мощность первого модельного слоя составляет 2 м в пределах водохранилища, в остальной части – 6 м.

Второй модельный слой соответствует слабопроницаемым отложениям (глинам и суглинкам). На большей части модели его мощность составляет 9 м, на некоторых участках мощность снижена. На участке, соответствующем руслу р. Воронеж и меньшему карьере, мощность второго слоя составляет 5 м, слабопроницаемый слой в пределах малого карьера не размыт на полную мощность. Глубина большого карьера, расположенного к востоку от острова, составляет в среднем 12 м, и в его пределах слабопроницаемый слой можно считать полностью размытым [157]. Тем не менее, в пределах карьера существует некоторый слой ила, который сформировался непосредственно в процессе работ по намыву острова и после их окончания. Точно мощность ила на дне карьера не определялась. Предположительно, ил имеет низкий коэффициент фильтрации, и включен во второй модельный слой. Поскольку в качестве характеристики фильтрационных свойств используется параметр A_0 , рассчитываемый по соотношению коэффициента фильтрации донных отложений к их мощности, точное определение каждой из этих характеристик по отдельности не требуется. По этой причине в модели мощность второго слоя в пределах карьера условно соответствует мощности ила и задана равной 0.5 м.

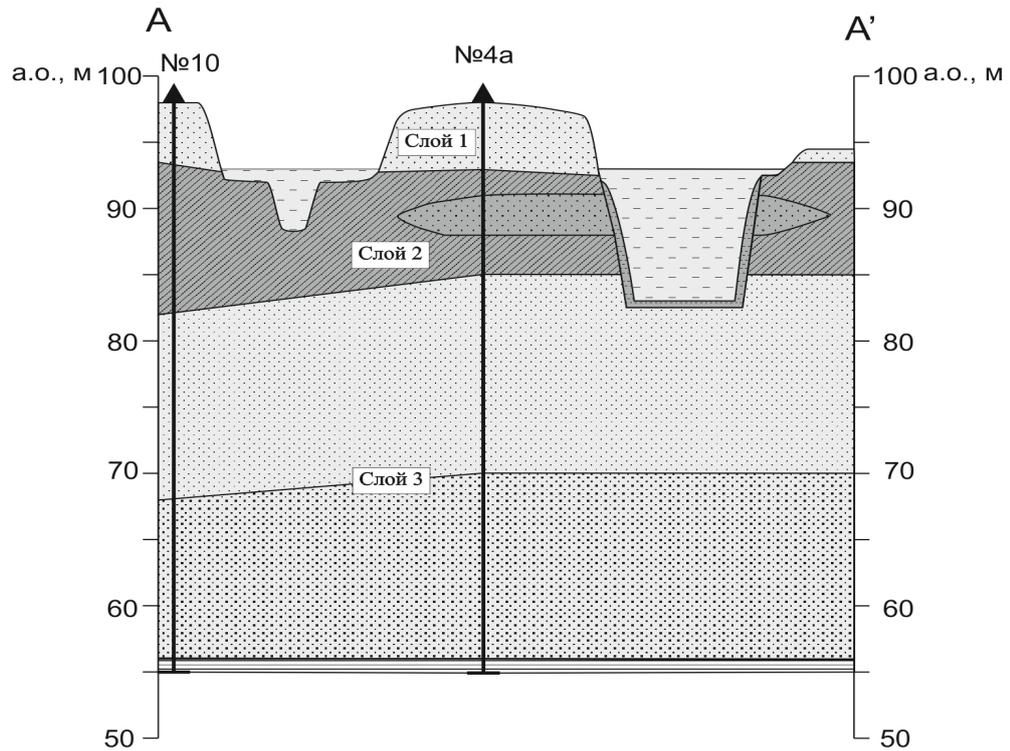


Рисунок 4.10. Схематический разрез по линии А – А' (по рисунку 4.6).

Третий модельный слой соответствует основному водоносному горизонту, приуроченному к неоген-четвертичным пескам. В указанных отложениях выделяют две разновидности: в верхней части залегают более мелкозернистые пески, в нижней – более крупнозернистые. Однако в разрезах скважин, расположенных в северной части острова, выделяется обратное расположение – крупнозернистые пески в верхней части, и мелкозернистые пески в нижней части водоносного горизонта. В целом, разрезы скважин плохо соответствуют друг другу. В Приложении 1 приведены разрезы по двум скважинам, 31н и 4р. Скважины расположены приблизительно на расстоянии 45 м. Абсолютная отметка устья скважины 4р – 95.5 м, отметка устья скважины 31н не зафиксирована. Однако, поверхность намывного острова пологая, без резких перепадов, и абсолютные отметки земли для двух указанных скважин не должны различаться более чем на 1 м.

При этом кровля неогеновых песков в скважине 4р выделена на глубине 20.5 м. В интервале глубин с 14.5 до 20.5 м описаны разнозернистые пески. В интервале с 20.5 до 37.5 м описан среднезернистый песок с включениями гравия и гальки, включения выделены на глубине 32-34 м. Слабопроницаемый слой на глубине 4.5-8.5 м описан как суглинок.

В скважине 31н кровля неогеновых отложений выделена на глубине 26 м. В интервале глубин 30 – 39.5 м описан мелкозернистый песок. Включения гравия и гальки отмечены в

интервале глубин с 13.5 до 30 м, в основании четвертичных песков на глубине 24–26 м обнаружены валуны. Слабопроницаемый слой на глубине 6–9.5 м описан как серая плотная глина.

При этом разрезы по трем эксплуатационным скважинам в ряду с 31н совпадают. Также совпадают разрезы по скважинам 4р и 5р с поправкой на различную отметку поверхности земли. Вероятнее всего различается не сам вскрытый геологический разрез, а его интерпретация при бурении. Эксплуатационная скважина 31н пробурена в 2009 г. ООО «ВПФ ПССВ». Наблюдательная скважина 4р пробурена в 2010 г. ООО НПФ «Воронежгидрогеоэкология». Разрезы скважин, выполненные одной организацией, сходятся друг с другом, и существенно отличаются от разрезов, выполненных другой организацией. При этом отметка кровли семилукских глин верхнего девона закономерно прослеживается по всем скважинам. Все рассматриваемые скважины бурились ударно-канатным методом, который не позволяет достоверно расчленять песчаные разрезы, с чем может быть связано такое расхождение в интерпретации разрезов.

Таким образом, точность расчленения неогеновых песков не позволяет отразить в модели существующую вертикальную фильтрационную неоднородность. По этой причине эксплуатируемый песчаный водоносный горизонт в модели задан одним слоем, мощность которого составляет 26,5 метров. Залегающие глубже девонские отложения в модели не отражены, их кровля считается непроницаемой границей.

Граничные условия. Инфильтрационное питание в модели не учитывается, верхняя граница задана непроницаемой. Это обусловлено несколькими причинами. Откачка моделируется в понижениях, от модели не требуется воспроизведения естественных абсолютных отметок подземных вод. Кроме того, две рассматриваемые откачки проведены в конце холодного времени года, поэтому в течение нескольких месяцев инфильтрационное питание заведомо отсутствовало или было невелико. По этой причине верхняя граница задана непроницаемой. Внешние плановые границы модели также заданы непроницаемыми. Положение внешних плановых границ выбрано с помощью региональной модели, упомянутой выше [5]. Предварительное моделирование откачки длительностью 30 суток и с дебитом 5000 м³/сут показывает, что на конец откачки понижение в размере 5 см сформируется на расстоянии не более 1.5 км от центральной скважины. Кроме того, к северу от ВПС-4 расположен действующий водозабор ВПС-11. Граница между зонами захвата этих двух водозаборов расположена приблизительно в 2 км к северу от намывного острова (Рисунок 4.2). Учитывая это, размер модели выбран равным 4 × 4 км. Центральные скважины двух рассматриваемых опытных откачек расположены приблизительно в центре модели.

Внутренними границами модели являются опытная скважина с заданным расходом и Воронежское водохранилище. Дебит откачек задан постоянным во времени в течении всей

откачки. Поскольку задача решается в понижениях, инфильтрационное питание в модели не учитывается.

Необходимо подробнее рассмотреть способ задания водохранилища в модели. В верхней части разреза выделяется прослой суглинков мощностью до 9 м. В пределах водохранилища суглинки залегают непосредственно под дном водохранилища, и, либо непосредственно контактируют с донными отложениями, либо залегают на небольшой глубине. Таким образом, представляется невозможным разделить фильтрационное сопротивление суглинков и донных отложений. По этой причине водохранилище задано без сопротивления донных отложений, вырожденное к граничному условию I рода. В принятой схеме фильтрационное сопротивление между водохранилищем и водоносным горизонтом формируется за счет выделенного прослоя суглинков (2 модельный слой) и зависит от его параметров.

Параметры. При обработке откачек методом калибровки моделей исходные значения геофильтрационных параметров приняты по результатам обработки опытных откачек графоаналитическими методами. Конкретные значения параметров приняты различными для двух рассматриваемых откачек и перечислены в следующем разделе.

Параметры песков, соответствующие первому модельному слою, отдельно не определялись. С другой стороны, обводненная мощность этих песков незначительна (Рисунок 4.8) и ожидается низкая чувствительность модели к фильтрационным параметрам первого слоя. По этой причине параметры первого модельного слоя специально не рассматривались, и приняты аналогичными параметрам песков, соответствующих третьему модельному слою.

4.2.3. Раздельная обработка опытных кустовых откачек на моделях

В первую очередь, для получения приблизительных значений интересующих параметров результаты двух опытных кустовых откачек были интерпретированы графоаналитическими методами. Подробно интерпретация откачек описана в отчете [157].

Для прогнозного моделирования эксплуатации водозабора необходимо уточнить значения самых важных параметров модели: коэффициента фильтрации песков K_n , вертикального коэффициента фильтрации слабопроницаемых отложений $K_{сл}$, коэффициента фильтрации донных отложений в пределах большого карьера K_o и упругой водоотдачи основного водоносного горизонта μ^* . Точных значений параметров K_n , $K_{сл}$ и K_o достаточно для расчета понижений в водозаборных скважинах и оценки максимально возможного водоотбора. Для отражения фильтрационного сопротивления слабопроницаемых отложений достаточно определить обобщенный параметр A_o , нет необходимости определять по отдельности параметры каждого типа отложений. Соответственно, параметр $K_{сл}$ является

эффективным параметром всей толщи слабопроницаемых отложений и не обязательно соответствует отдельным прослоям. Кроме того, точную конфигурацию фильтрационного окна (карьера) в слабопроницаемом слое аналитическими методами учесть невозможно. По этой причине невозможно разделить начальные значения параметров слабопроницаемых отложений K_{cl} и K_o . Начальное значение коэффициента фильтрации донных отложений в пределах карьера принимается равным коэффициенту фильтрации остальной части слабопроницаемого слоя.

Для откачки 2011 года начальные значения геофильтрационных параметров были взяты по результатам обработки откачки методом эталонных кривых, средние по скважинам № 10а, 4н и 5н. Проводимость основного водоносного горизонта $T = 1630 \text{ м}^2/\text{сут}$, соответственно, $K_n = 60 \text{ м/сут}$. Параметр $A_0 = 146 \text{ сут}$, соответственно, K_{cl} и $K_o = 0.06 \text{ м/сут}$. Упругая водоотдача эксплуатируемого водоносного горизонта $\mu^* = 7.5 \times 10^{-4}$. Выбранные значения параметров дали хорошее совпадение модельных и наблюдаемых понижений для периода проведения откачки (Рисунок 4.11). Восстановление на модели воспроизведено хуже (Рисунок 4.12).

Калибровка производилась с помощью программы UCODE. Поскольку используется единственный набор данных (наблюдения за понижениями уровня), допустимо использовать единичные весовые коэффициенты, как указано в разделе 2.1. При калибровке значения параметров практически не изменились (Таблица 4.1). График модельного понижения уровня при откалиброванных значениях параметров приведен на рисунке 4.13.

Таблица 4.1. Значения параметров модели откачки 2011 года до и после калибровки.

Параметр	Значение до калибровки	Значение после калибровки
Коэффициент фильтрации песков K_n , м/сут	60	58
Эффективный коэффициент фильтрации слабопроницаемых отложений K_{cl} , м/сут	0.06	0.075
Коэффициент фильтрации донных отложений, K_o м/сут	0.06	0.05
Упругая водоотдача μ^* , д.е.	7.5×10^{-4}	7.5×10^{-4}

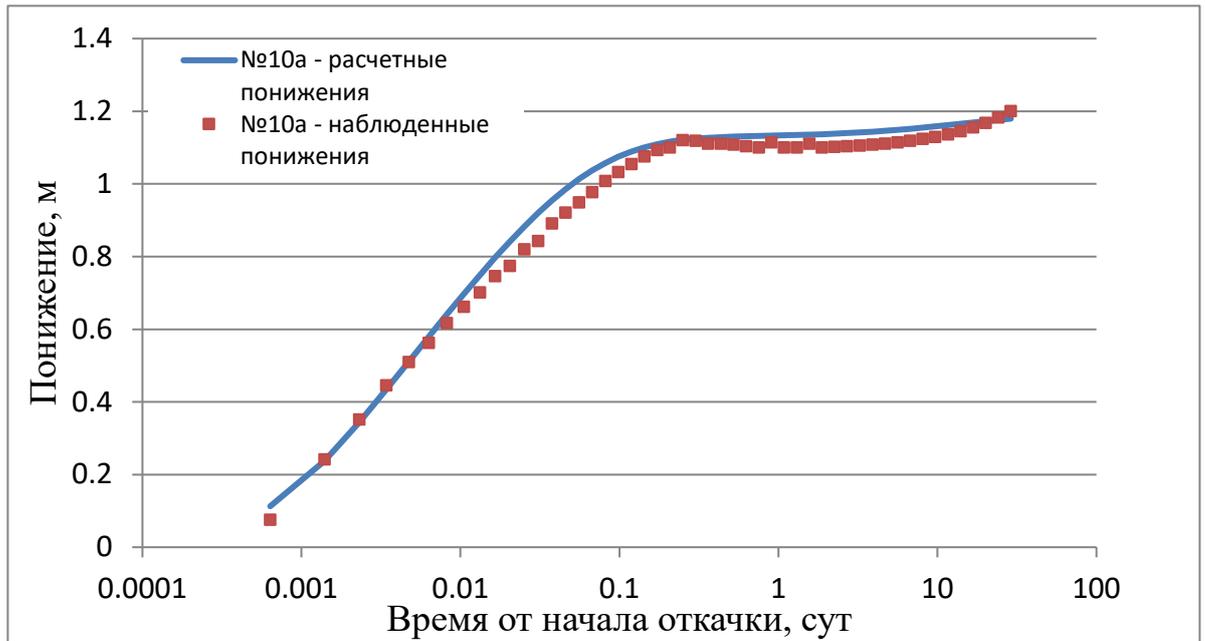


Рисунок 4.11. Сравнение наблюдаемых и модельных понижений в скважине №10а в период откачки при начальных значениях параметров.

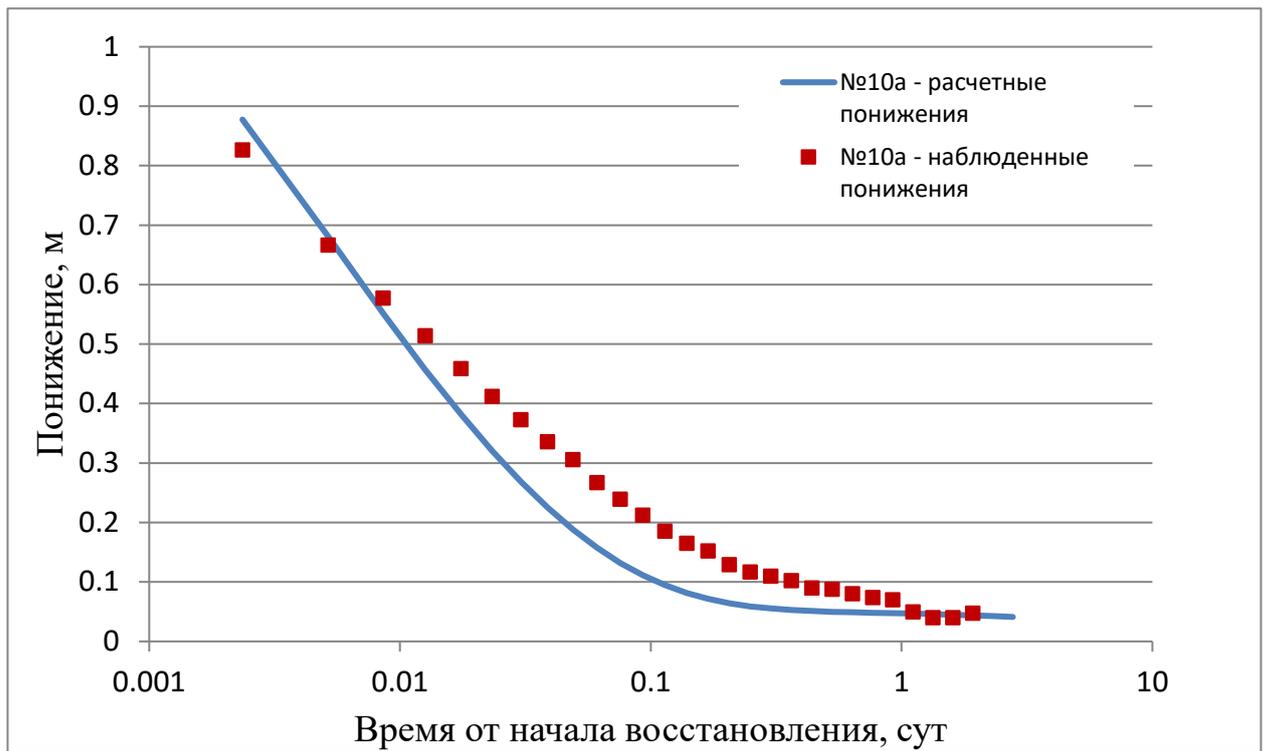


Рисунок 4.12. Сравнение наблюдаемых и модельных понижений в скважине №10а в период восстановления уровней.

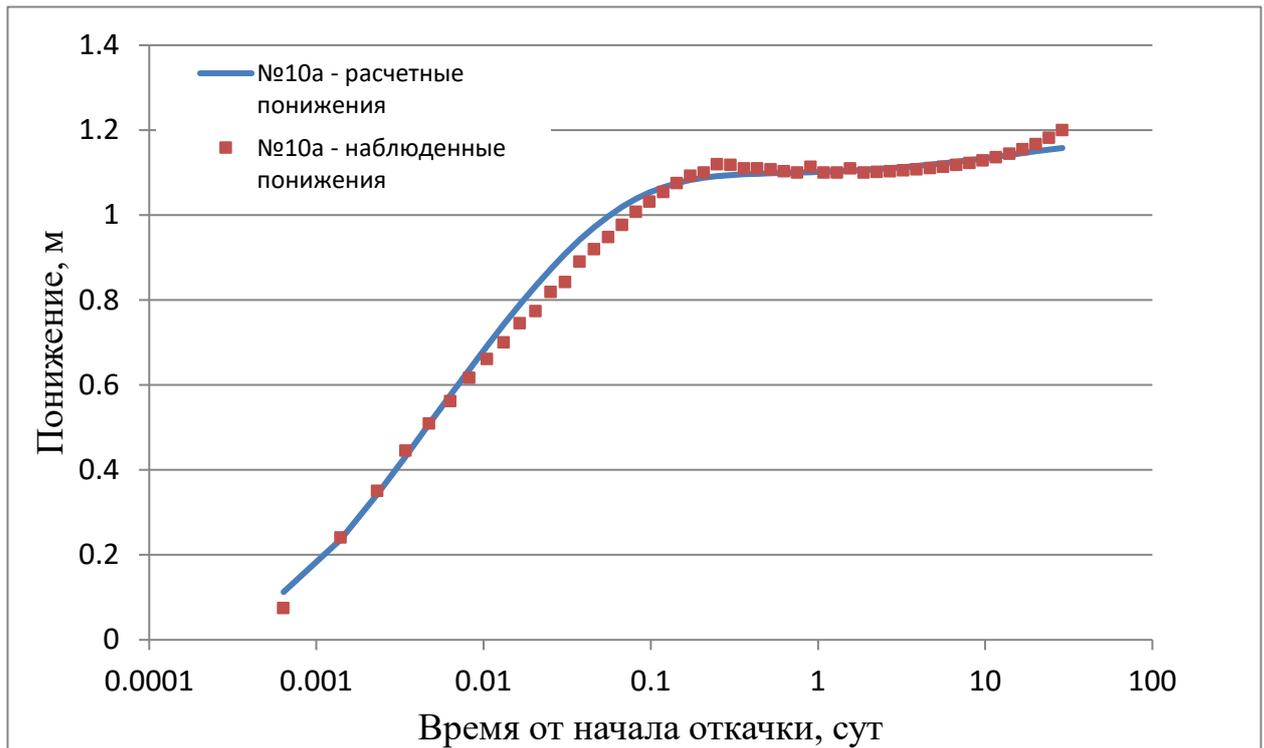


Рисунок 4.13. Сравнение наблюдаемых и модельных понижений в скважине №10а в период откачки при откалиброванных значениях параметров.

Откачка 1998 года также была переинтерпретирована методом калибровки модели. Обработка этой откачки представляет собой более сложную задачу, поскольку в течении откачки менялся уровень водохранилища, что влияло на ход уровней подземных вод в наблюдательных скважинах. Известное изменение уровня водохранилища задано в модели ступенчатым (Таблица 4.2).

Таблица 4.2. Изменение уровня водохранилища в модели.

Время от начала откачки, сут	Изменение уровня водохранилища относительно начального, м
0 – 8.7	0
8.7 – 11.2	0.07
11.2 – 13.2	0.14
13.2 – 15.7	0.20
15.7 – 18.2	0.15
18.2 – 20.7	0.10
20.7 – 23.2	0.15
23.2 – 25.7	0.25
25.7 – 30	0.35

В качестве начальных значений геофильтрационных параметров при калибровке модели откачки 1998 года также приняты значения, полученные при графоаналитической обработке. Проводимость основного водоносного горизонта $T = 1910 \text{ м}^2/\text{сут}$, соответственно, $K_n = 72 \text{ м/сут}$. Параметр $A_0 = 46 \text{ сут}$, соответственно, K_{cl} и $K_o = 0.2 \text{ м/сут}$.

На рисунке 4.14 приведено сравнение наблюдаемых и расчетных понижений уровня в наблюдательной скважине. Расхождение уровней на конец первых суток откачки достигает 0.2 м, при этом начальный этап откачки модель воспроизводит хорошо. Это свидетельствует о том, что фильтрационное сопротивление слабопроницаемого слоя занижено. Эффективный коэффициент фильтрации приблизительно в три раза выше, чем для откачки 2011 года. Скорее всего, эта завышенная оценка связана с фильтрационным окном. Предварительная интерпретация откачки производилась для схемы однородного слабопроницаемого слоя постоянной мощности. В модели учтен участок размыва, в пределах которого фильтрационное сопротивление между водохранилищем и водоносным горизонтом значительно снижено. Это, в свою очередь, может обуславливать завышенную оценку коэффициента фильтрации при графоаналитической обработке. Влияние участка размыва на ход откачки 1998 года более значительно, чем на ход откачки 2011 года за счет его расположения (Рисунок 4.6).

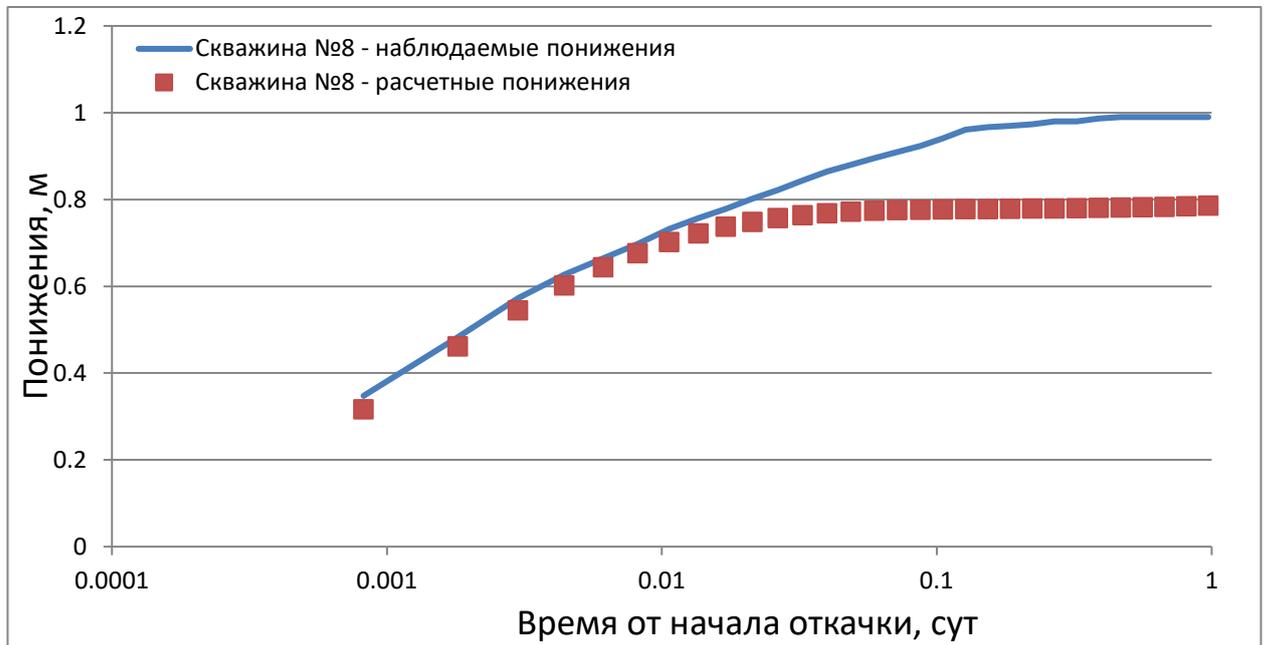


Рисунок 4.14. Сравнение наблюдаемых и модельных понижений в скважине №8 при начальных значениях параметров.

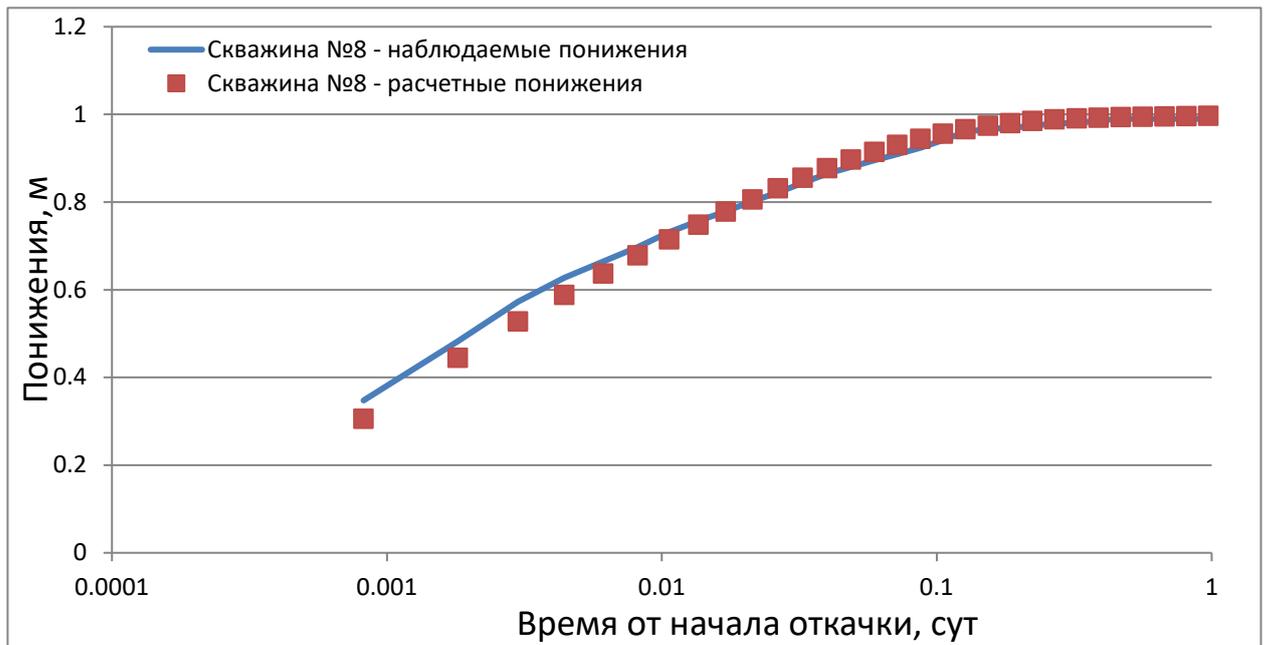


Рисунок 4.15. Сравнение наблюдаемых и модельных понижений в скважине №8 при откалиброванных значениях параметров (логарифмический масштаб времени).

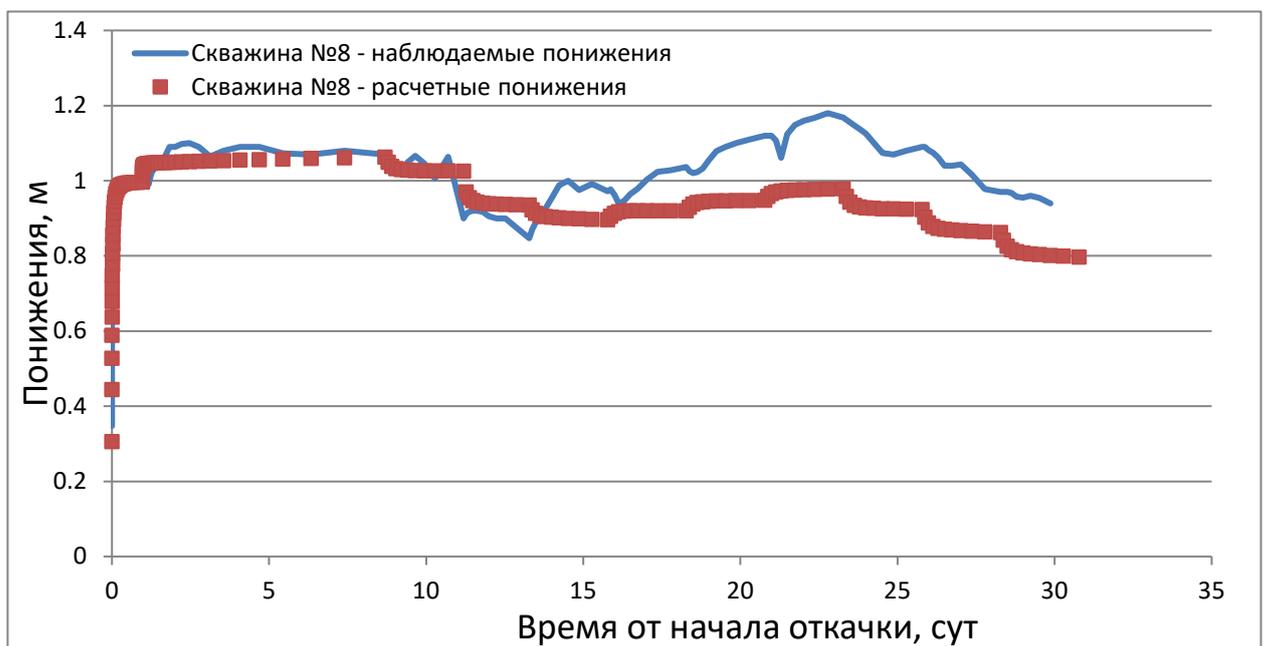


Рисунок 4.16. Сравнение наблюдаемых и модельных понижений в скважине №8 при откалиброванных значениях параметров (линейный масштаб времени).

Помимо изменения уровня водохранилища имело место изменение дебита опытной скважины в течение откачки, не отраженное в имеющихся в распоряжении автора данных. Точные значения дебита на каждый момент времени неизвестны. По этой причине наиболее важным является начальный период откачки (первые сутки), в течение которого дебит откачки можно принять постоянным и равным значению, зафиксированному в журнале откачки.

Калибровка также была выполнена с единичными весовыми коэффициентами для всех замеров понижений. С откалиброванными параметрами модель намного лучше воспроизводит ход откачки (Рисунок 4.15, Рисунок 4.16). Расхождение наблюдаемых и расчетных понижений во второй половине периода откачки скорее всего связано с изменением дебита опытной скважины, которое достоверно не известно. Существенно изменились по сравнению с начальными значения коэффициентов фильтрации, описывающие слабопроницаемый слой (Таблица 4.3).

Таблица 4.3. Значения параметров модели откачки 1998 года до и после калибровки.

Параметр	Значение до калибровки	Значение после калибровки
Коэффициент фильтрации песков K_n , м/сут	72	88
Условный коэффициент фильтрации слабопроницаемых отложений $K_{сл}$, м/сут	0.2	0.075
Коэффициент фильтрации ила K_o м/сут	0.2	0.05

Результатами обработки двух откачек стали два набора различных значений параметров. Наиболее сильно различаются значения коэффициентов фильтрации песков, а, следовательно, и проводимости основного водоносного горизонта. Независимая обработка опытов не позволяет составить единую модель всего участка водозабора ВПС-4. Таким образом, классический подход к обработке опытных откачек не позволяет решить основную задачу – оценки геофильтрационных параметров для дальнейшего прогнозного моделирования водозабора. Результаты двух опытов не позволяют выбрать значение проводимости для составления прогноза. Значения коэффициента фильтрации для эксплуатируемого водоносного горизонта различаются в полтора раза для двух опытов. Необходим другой подход к использованию имеющихся данных. В этом случае может быть полезна предложенная методика калибровки (см. главу 2).

4.2.4. Совместная калибровка по данным откачек и режимных наблюдений

Как указано выше, кроме наблюдений за понижениями в ходе двух опытных откачек, известны замеры уровней подземных вод в рамках режимных наблюдений на водозаборе ВПС-4. Для уточнения геофильтрационных параметров предлагается проведение совместной

калибровки двух моделей опытных откачек и эпигнозной модели работы водозабора в целом. Совместная калибровка моделей по полному набору данных описана в статье [38].

При совмещении наблюдений различных типов становится важным правильный выбор весовых коэффициентов. Рассмотрим подробнее выбор весовых коэффициентов для эпигнозной модели. Особенности определения весовых коэффициентов связаны с отличиями эпигнозной модели работы всего водозабора от модели опытных откачек. Во-первых, на ней рассчитываются уровни, а не понижения, что требует учета естественного потока подземных вод. Величина инфильтрационного питания задана равной 75 мм/год для леса и 150 мм/год для прочих ландшафтов (принято по [49]). Во-вторых, учитывается влияние расположенного вблизи рассматриваемого участка действующего водозабора ВПС-3. Схематизация разреза модели действующих водозаборов на участке ВПС-4 соответствует схематизации моделей откачек, но в плане расширена на юг до участка ВПС-3. На рисунке 4.19 приведен фрагмент схемы региональной модели (Рисунок 4.2), на котором обозначена граница общей модели для водозаборов № 3 и 4. Южная граница проведена по линии тока.

Оптимальный набор параметров должен позволять рассчитать достоверные уровни подземных вод при различных значениях суммарного водоотбора. При сравнении изменения уровней подземных вод с изменением дебита водозабора видна корреляция. Увеличение водоотбора коррелирует со снижением уровней подземных вод, что и соответствует ожиданиям (Рисунок 4.18). Это согласуется с принятой геофильтрационной схемой участка. Уровни подземных вод в наблюдательных скважинах должны быть чувствительны к изменению суммарного водоотбора. Для более точной калибровки целесообразно выбрать несколько периодов с разными дебитами. Также желательно моделировать стационарный режим работы водозабора. При моделировании стационарного режима фильтрации расчетные напоры в каждом стресс-периоде не зависят от остальных периодов. Таким образом, несколько периодов могут быть объединены в одну модель.

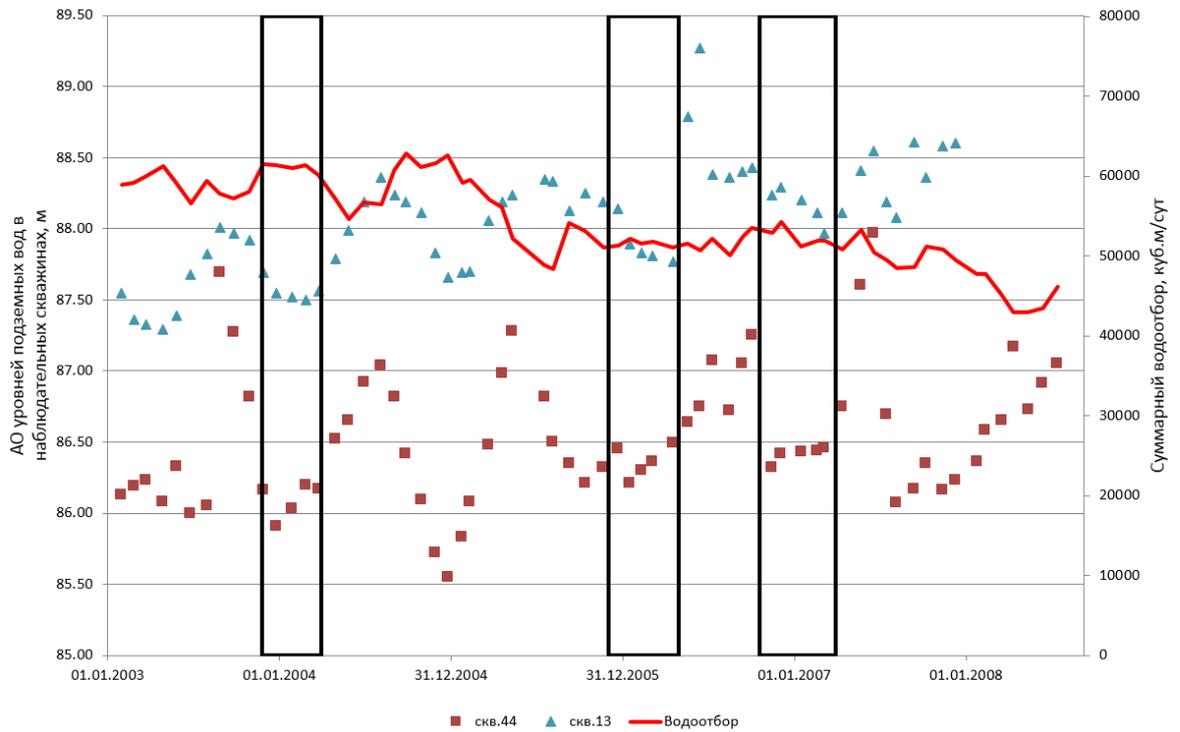


Рисунок 4.17. График изменения уровней подземных вод и водоотбора на ВПС-4. Рамками выделены периоды, выбранные для моделирования.

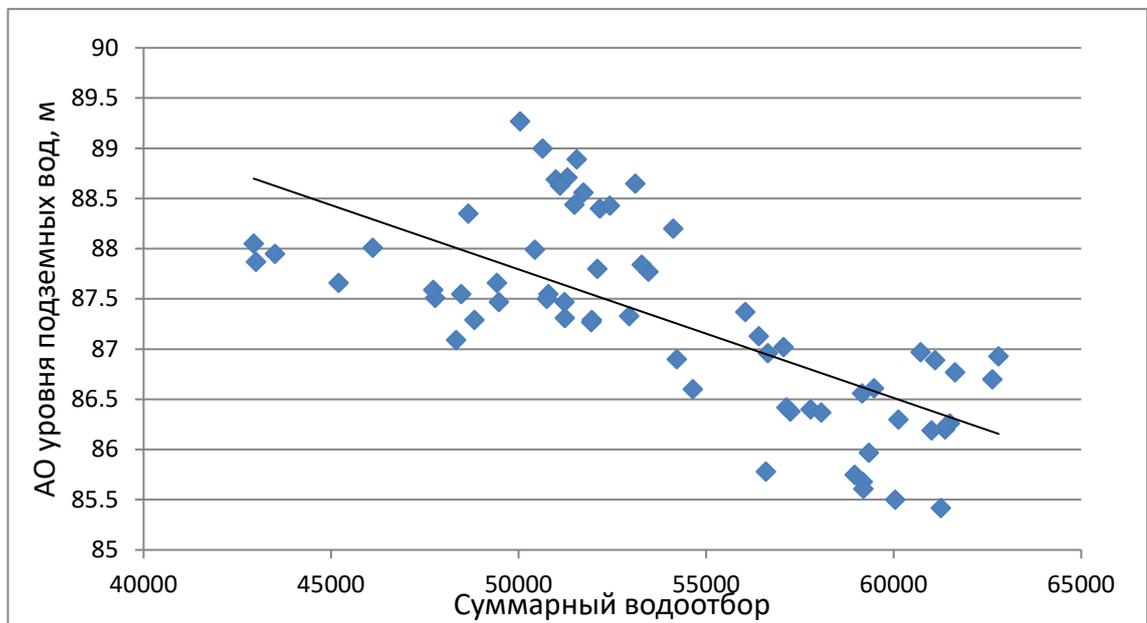


Рисунок 4.18. Сопоставление суммарного водоотбора ВПС-4 и уровней подземных вод по наблюдательной скважине №10. Коэффициент корреляции $R = -0,7$.

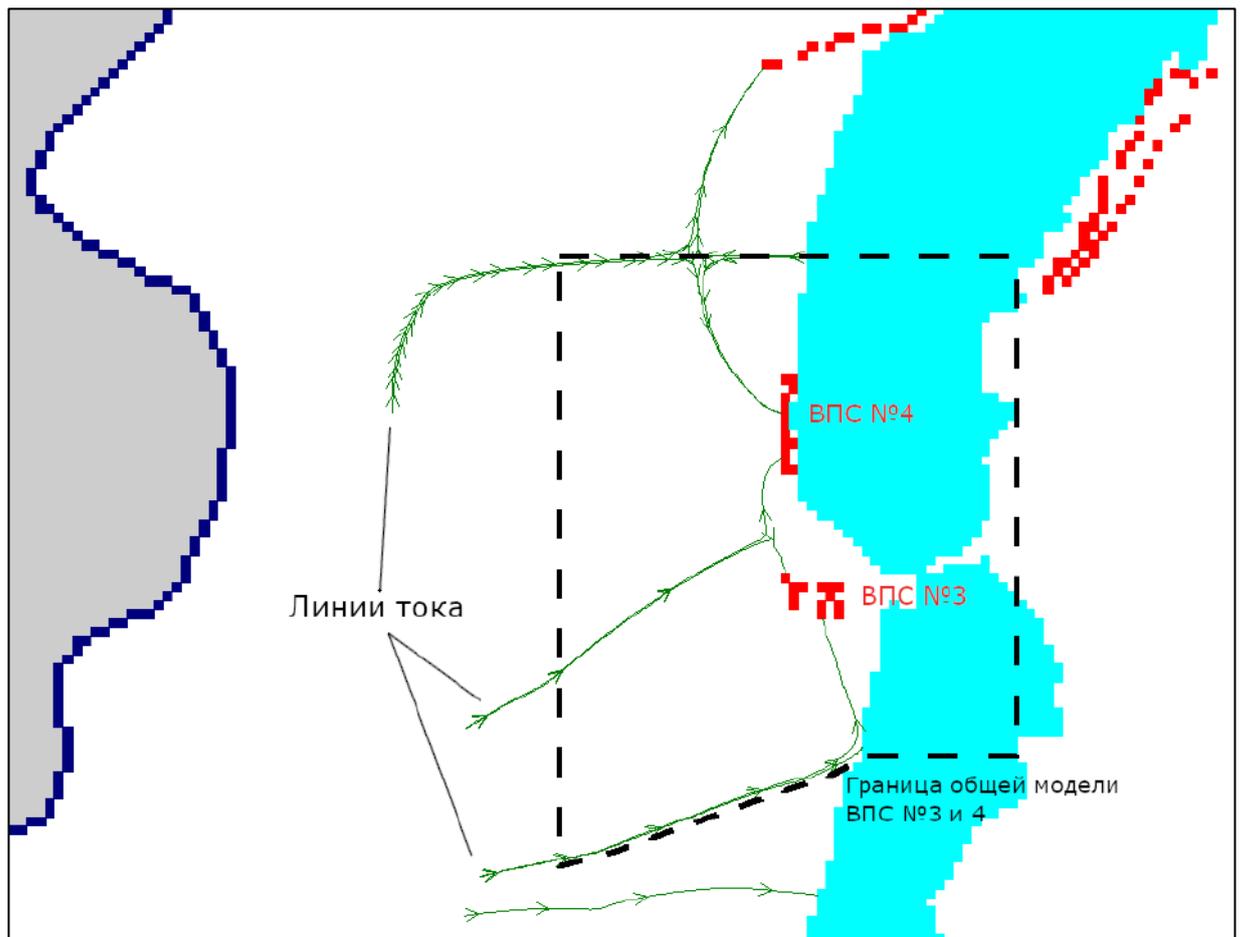


Рисунок 4.19. Выбор границы общей модели водозаборов ВПС-3 и ВПС-4.

Из всех доступных режимных наблюдений выбираются периоды, в течение которых режим работы водозабора можно считать стационарным. Было оценено время наступления стационарного режима работы водозабора. Значения модельных параметров принимались равными средним арифметическим значений, оцененных при обработке двух опытных откачек. Коэффициент фильтрации песков $K_n = 73$ м/сут; K_f слабопроницаемых отложений $K_{сл} = 0.075$ м/сут; K_f донных отложений в карьере $K_0 = 0.05$ м/сут. Упругая водоотдача $\mu^* = 7.5 \times 10^{-4}$; гравитационная водоотдача $\mu = 0.1$. Суммарный дебит ВПС-4 задан равным $51\,450$ м³/сут, дебит ВПС-3 – равным $25\,218$ м³/сут. Эти величины соответствуют среднему водоотбору за 2006 год. Для оценки времени установления стационарного режима было задано три стресс-периода. Первый стресс-период стационарный, служит для расчета условно естественного положения уровней подземных вод. Водозаборные скважины в первом стресс-периоде неактивны. Второй стресс-период – нестационарный, водозаборные скважины активны. Третий стресс-период также нестационарный, служит для оценки времени установления стационарного режима при изменении дебита. Дебит водозаборных скважин задан на 20% выше, что соответствует известному диапазону изменения (Рисунок 4.17).

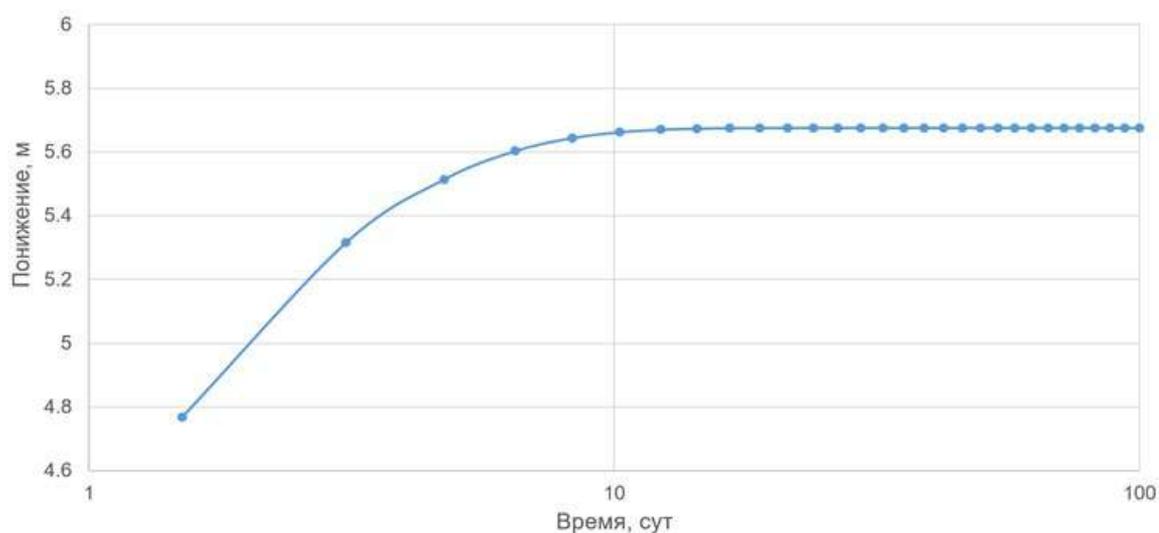


Рисунок 4.20. Изменение уровня в наблюдательной скважине №10 после активации водозабора в модели.

При проведении опытных откачек стационарный режим устанавливался приблизительно через 3 часа после начала откачки. При моделировании работы водозабора в целом стационарный режим фильтрации устанавливается приблизительно через 12 суток после активации скважин в модели (Рисунок 4.20), что существенно меньше продолжительности выбранных меженных периодов.

В первую очередь, выбирались месяцы, когда уровень водохранилища заведомо не должен изменяться – летняя и зимняя межень. Точные границы по времени выбираются по известным замерам уровней в наблюдательных скважинах. Кроме того, изменение суммарного водоотбора должно быть минимально возможным (Рисунок 4.17). Для моделирования выбраны следующие три периода: декабрь 2003 – март 2004 года; декабрь 2005 – апрель 2006 года; ноябрь 2006 – март 2007 года. Для каждого стресс-периода задавался средний дебит водозабора. Все имеющиеся замеры уровней также усреднялись по каждой скважине.

Таким образом, использованные при калибровке режимные наблюдения отличаются по своему содержанию от прямых измерений уровней. Наблюдения, используемые для стационарной модели работы водозабора, являются осредненными из нескольких замеров величинами. Замеры уровней при режимных наблюдениях производятся редко, подвержены непродолжительным, и потому неизвестным, изменениям дебита водозабора и влиянию естественного режима подземных вод, и по этой причине имеют более низкую точность. Тем не менее, именно режимные наблюдения характеризуют работу водозабора в целом. Поскольку задачей являлась переоценка запасов и прогнозное моделирование работы всего водозабора, данные режимных наблюдений следует признать не менее важными, чем более точные и полные наблюдения за ходом уровней подземных вод при откачках. По этой причине коэффициент α , входящий в формулу (2.5) выбран равным, по 1/3 для каждого набора данных.

Таблица 4.4. Общая характеристика используемых наборов данных.

Набор данных	Количество отдельных замеров	Вес каждого отдельного наблюдения
Замеры понижений для откачки 1998 года	1091	4200
Замеры понижений для откачки 2011 года	270	17000
Осредненные режимные замеры уровней подземных вод в наблюдательных скважинах ВПС-4	18	Индивидуальные веса приведены в таблице 4.5

Таблица 4.5. Расчет весов для режимных наблюдений.

Скважина		скв.44	скв.10	скв.11	скв.12	скв.13	скв.14
декабрь 2003 – март 2004	Количество замеров	5	5	5	5	5	5
	Средний уровень	86.09	86.24	87.81	86.94	87.56	87.47
	Дисперсия уровней	0.015	0.002	0.006	0.020	0.006	0.042
	Назначенный вес	1722	12642	3947	1294	4618	603
декабрь 2005 – апрель 2006	Количество замеров	6	6	4	6	6	6
	Средний уровень	86.36	88.57	89.07	88.07	87.94	87.63
	Дисперсия уровней	0.011	0.017	0.003	0.013	0.033	0.083
	Назначенный вес	2430	1529	7661	2011	784	308
ноябрь 2006 – март 2007	Количество замеров	6	6	6	6	6	6
	Средний уровень	86.55	87.31	88.12	87.78	88.21	88.81
	Дисперсия уровней	0.119	0.076	0.109	0.256	0.025	0.380
	Назначенный вес	215	334	233	100	1035	67

Стандартная ошибка σ для всех замеров понижений принята равной 0.01 м, в соответствии с ожидаемой инструментальной ошибкой измерений (по ГОСТ 23278-2014). Следовательно, дисперсия равна $\sigma^2=10^{-4}$ м². Каждое из «наблюдений» используемых для сравнения результатов стационарной модели, имеет собственную дисперсию. Характеристика имеющихся наборов данных и использованные веса приведены в таблицах 4.4 и 4.5.

Большое, до нескольких порядков, различие весов объясняется указанным выше различием способа получения наблюдений. Например, дисперсия, рассчитанная для третьего периода режимных наблюдений в скважине №11 составляет $\sigma^2=0.11$ м², что на 3 порядка превышает дисперсию, принятую для замеров понижений уровней при откачках. Положение режимных наблюдательных скважин показано на рисунке 4.6.

Три описанные модели, откачек и действующих водозаборов, рассматривались совместно. Их выходные данные зависели от одних и тех же параметров, описанных в разделе 4.2.3: K_p , который определяет проводимость эксплуатируемого водоносного горизонта, $K_{сл}$ и K_0 , определяющие связь подземных и поверхностных вод. Порядок совместной калибровки нескольких моделей описан в разделе 2.5 и показан на рисунке 2.3.

В результате совместной калибровки моделей по трем наборам данных получились следующие значения параметров: $K_{п} = 76$ м/сут; $K_{сл} = 0.05$ м/сут; $K_0 = 0.03$ м/сут. Хотя по сумме квадратов невязок этот набор параметров является оптимальным, он не позволяет на модели воспроизвести ход откачек с достаточной точностью (Рисунок 4.21 и Рисунок 4.22). Невязка расчетных понижений достигает 20% на этапе стационарного режима.

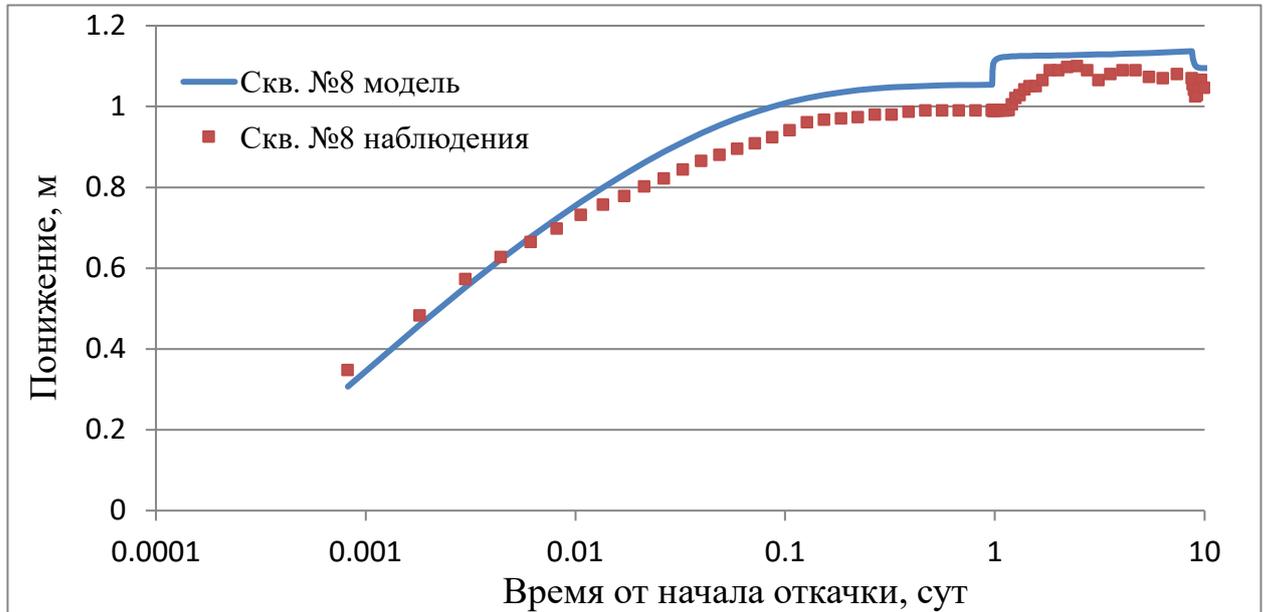


Рисунок 4.21. Сравнение модельных и наблюдаемых понижений в наблюдательной скважине №8 для откачки 1998 года.

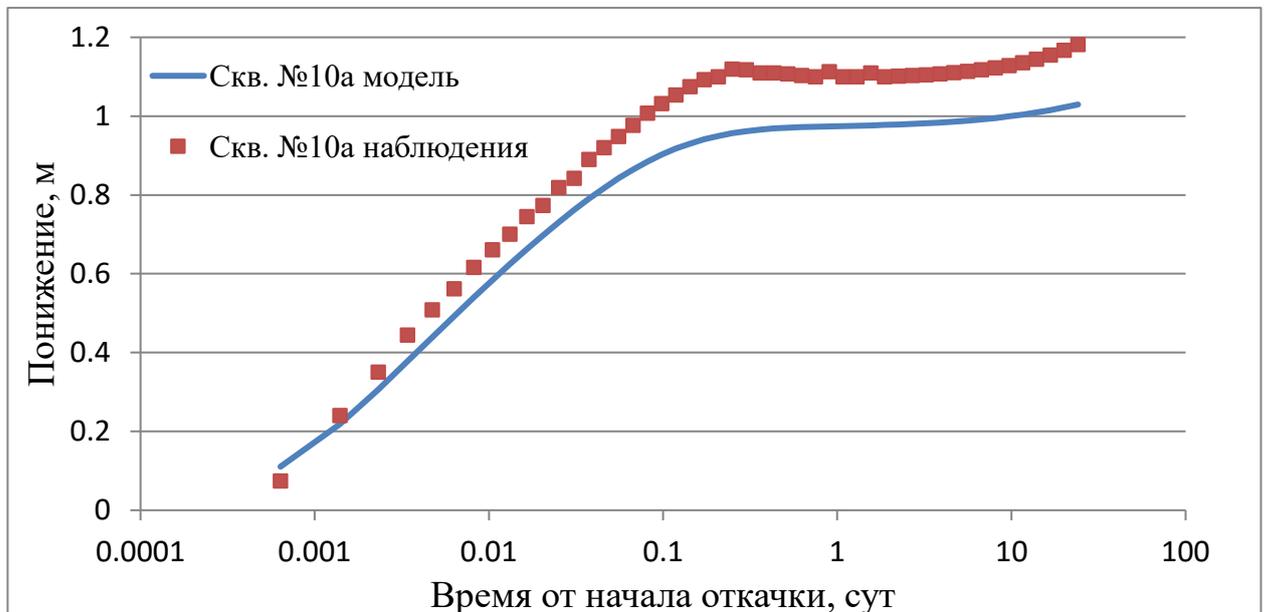


Рисунок 4.22. Сравнение модельных и наблюдаемых понижений в наблюдательной скважине №10а для откачки 2011 года.

Полученные результаты могут свидетельствовать о наличии ошибки в принятой геофильтрационной схеме. Наиболее оптимальное решение при выбранной схеме не позволяет считать модель достоверной, из чего можно сделать вывод, что схема однородного водоносного горизонта является слишком сильным упрощением.

Mary Hill [98] рекомендует начинать разработку модели с наиболее простой схемы, и усложнять модель только при необходимости. Это обусловлено тем, что фактических данных об изучаемом объекте всегда недостаточно. При усложнении используемой схемы увеличивается область поиска «правильного» варианта модели. Например, при увеличении количества параметров в геометрической прогрессии увеличивается число их возможных сочетаний. В связи с этим обостряется проблема неединственности решения обратной задачи и снижается надежность обоснования варианта, выбираемого для проведения прогнозных расчетов.

В данном случае необходимость усложнения модели связана с невозможностью воспроизвести в схеме однородного водоносного горизонта все имеющиеся замеры с желаемой точностью. В качестве первого шага усложнения модели предлагается деление на две зоны. Точной информации о неоднородности эксплуатируемого водоносного горизонта нет. Здесь необходимо оговорить, что проверяется принципиальная необходимость усложнения модели. Надежно определить точную схему фильтрационной неоднородности водоносного горизонта решением обратной задачи практически невозможно. Охарактеризовать схему неоднородности по прямым, полевым и лабораторным, опробованиям также можно только приблизительно. Как указано выше, работа с моделью может помочь качественно охарактеризовать водоносный горизонт и выделить более вероятные схемы неоднородности из всех возможных [74].

Структурно неоднородность может быть связана с погребенной палеодолиной р. Дон [45]. Эта идея использована для зонирования. Минимальное усложнение модели – две зоны с различной проводимостью, разделенные прямолинейной границей. Для проверки выбрана граница, проходящая через середину водозабора ВПС-4 и направление, приблизительно соответствующее простиранию палеодолины (Рисунок 4.1 и Рисунок 4.23).

В новой постановке задачи для основного водоносного горизонта необходимо определить два параметра: коэффициент фильтрации песков восточной зоны $K_{пв}$ и коэффициент фильтрации песков западной зоны $K_{пз}$. Методика калибровки не изменилась. После ее проведения были получены следующие значения параметров: $K_{пв} = 58$ м/сут; $K_{пз} = 97$ м/сут; $K_{сл} = 0.07$ м/сут; $K_0 = 0.007$ м/сут. При этих значениях параметров все три модели показывают лучшее соответствие фактическим данным (Рисунок 4.24 и Рисунок 4.25). Результаты моделирования откачки 1998 года изменились мало, но при этом значительно снизилось расхождение модельных и наблюдаемых понижений для откачки 2011 года.

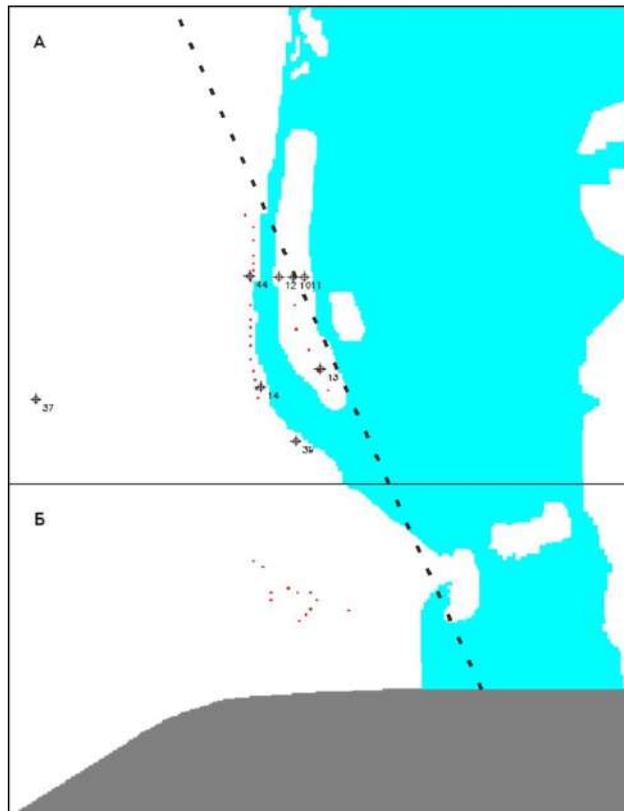


Рисунок 4.23. Граница двух предполагаемых зон с различной проводимостью, показана пунктиром.

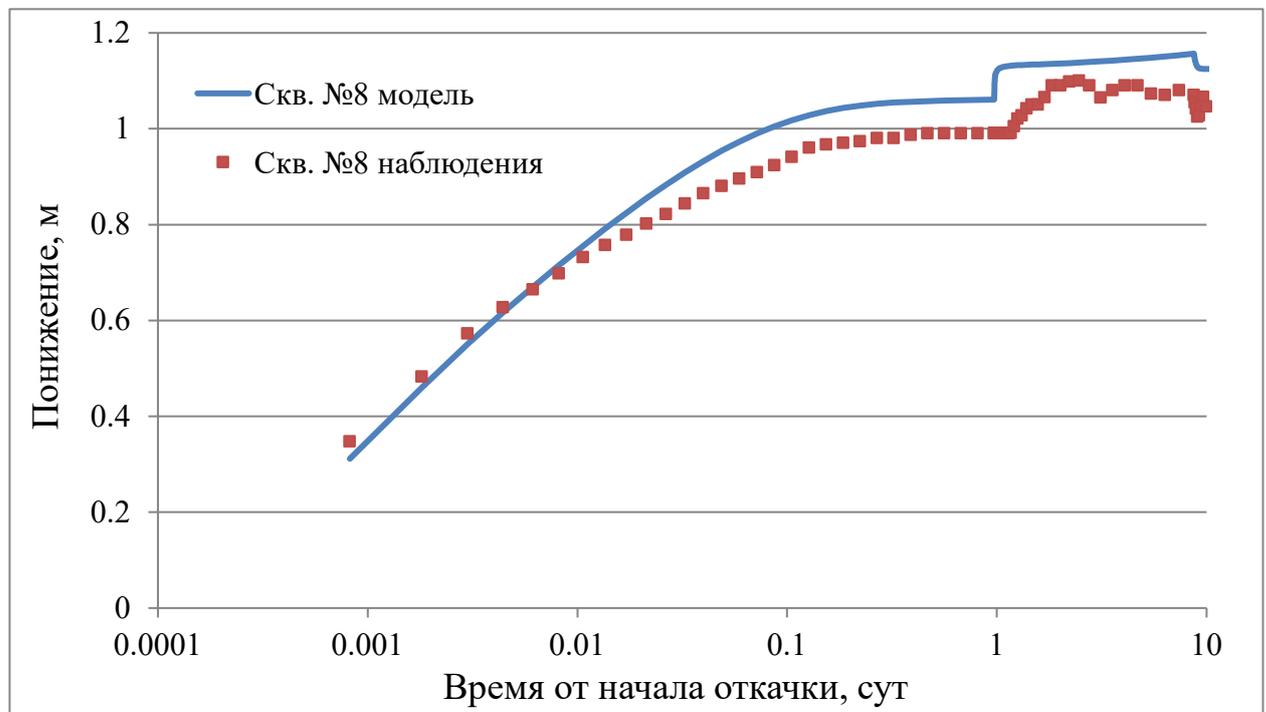


Рисунок 4.24. Сравнение модельных и наблюдаемых понижений в наблюдательной скважине №8 для откачки 1998 года.

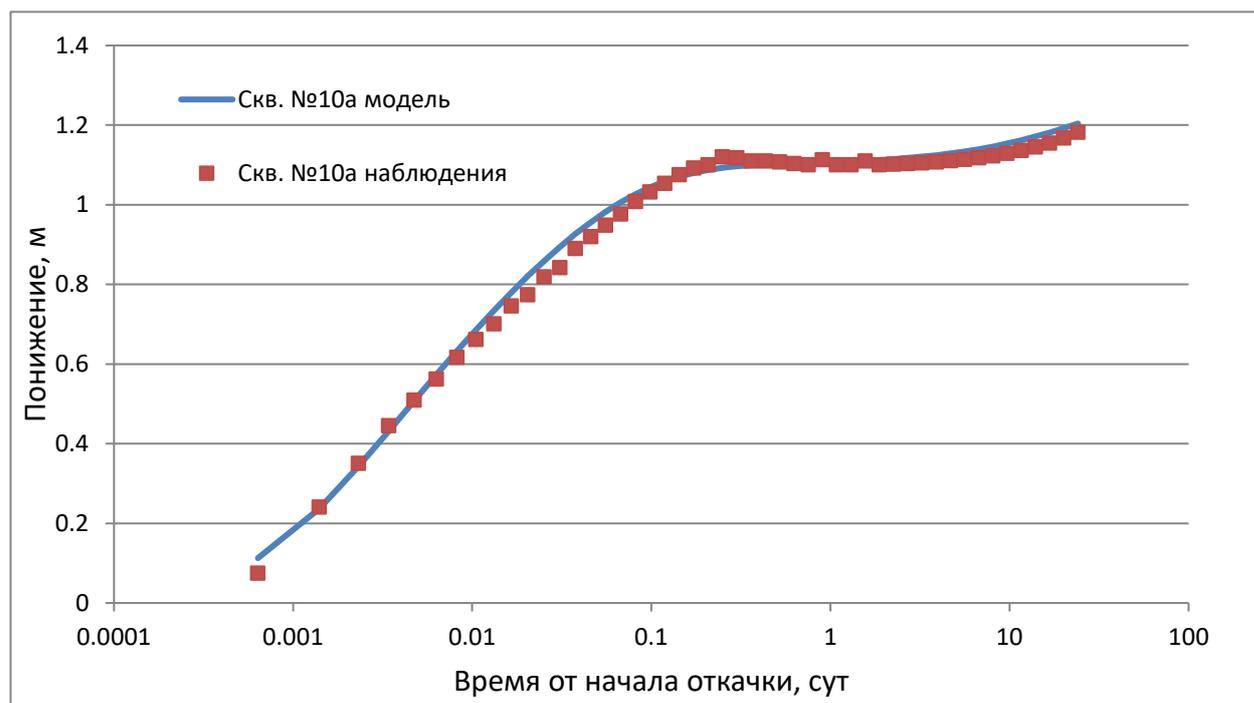


Рисунок 4.25. Сравнение модельных и наблюдаемых понижений в наблюдательной скважине №10а для откачки 2011 года.

Таким образом, даже небольшое усложнение модели позволило получить меньшие невязки между расчетными и фактическими понижениями. Учитывая, что граница была выбрана произвольно, следует проверить несколько альтернативных вариантов ее расположения и количества зон. Для различных вариантов зонирования требуется перезапускать процесс калибровки, и каждому варианту будут соответствовать свои значения коэффициентов фильтрации. Из нескольких альтернативных вариантов наиболее вероятным следует считать тот, при котором целевая функция наименьшая.

Проверив соответствующие альтернативные гипотезы, с помощью метода зонирования можно оценить на каком фланге водозабора проводимость ниже, на каком – выше, разницу между максимальной и минимальной проводимостью. Основным недостатком такого применения метода зонирования является высокая трудоемкость – требуется проверка и анализ большого числа альтернативных гипотез.

Другим рассмотренным методом является метод пилотных точек. Применительно к участку ВПС-4 наибольший интерес представляет собой пространственная неоднородность проводимости эксплуатируемого водоносного горизонта. Учитывая, что наблюдательные скважины расположены в сравнительно небольшой области в центре рассматриваемого участка, нецелесообразно задавать неоднородность на всей площади модели. В первую очередь, необходимо определить размер области для определения неоднородности. Для этого

весь третий модельный слой разделили на квадратные области 200×200 м, в каждой области назначили отдельный параметр (коэффициент фильтрации). Общий размер модели составляет 4000×4000 м, в общей сложности получилось 400 областей. Значения всех 400 коэффициентов фильтрации для проведения анализа чувствительности приняты равными 76 м/сут. Значения всех модельных параметров приняты по результатам совместной калибровки трех моделей по схеме однородного горизонта. Анализ чувствительности проведен для коэффициентов фильтрации третьего модельного слоя на модели откачки 2011 года. Построенная карта чувствительности приведена на рисунке 4.26. Значения чувствительности нормированы, максимальная величина принята равной единице. Видно, что чувствительность резко снижается при удалении от центральной скважины. Поэтому для детального анализа неоднородности выбрана меньшая область, показанная на рисунке сеткой. Эта область имеет размер 1100×2000 м.

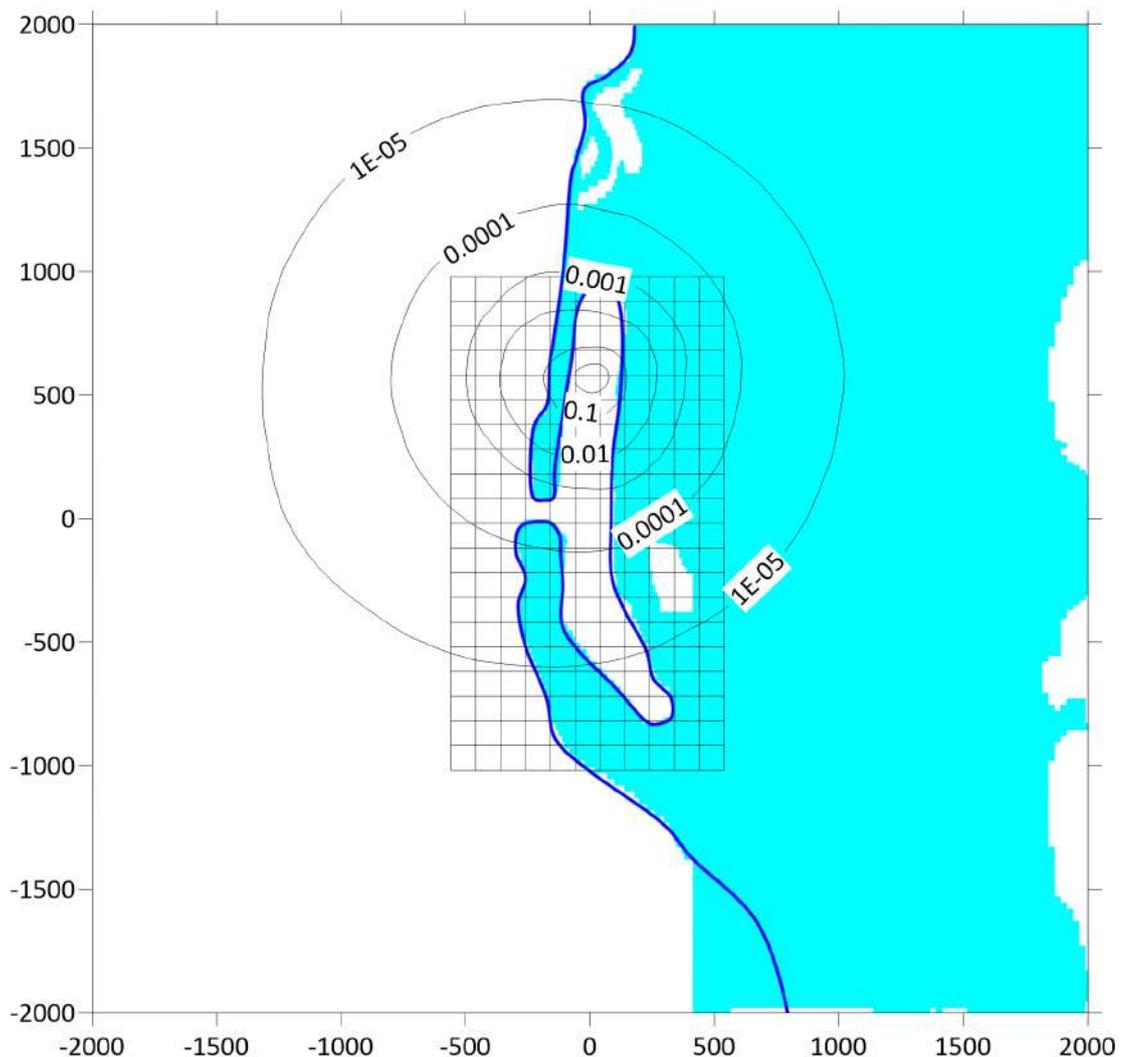


Рисунок 4.26. Чувствительность коэффициента фильтрации к наблюдениям откачки 2011 г.

Указанная область, в свою очередь, разделена на квадратные участки размером 100×100 м, в общей сложности 220 участков. Для этой области рассчитана чувствительность коэффициентов фильтрации ко всем наблюдениям, используя три разработанные модели по схеме однородного водоносного горизонта. Карта чувствительности представлена на рисунке 4.27. Построенная карта отражает обобщенную чувствительность, нормированную относительно максимального значения. Расположение области с максимальной чувствительностью в центре намывного острова обусловлено тем, что в этом месте расположена центральная скважина откачки 1998 года, а также три режимных наблюдательных скважины из шести.

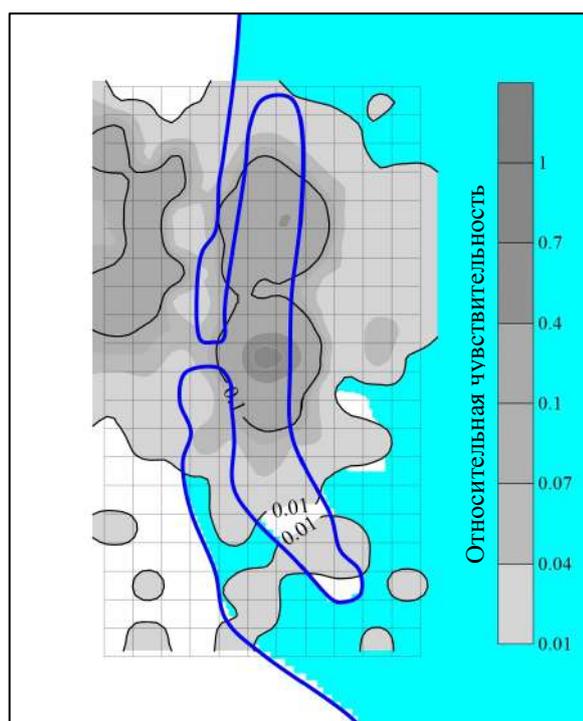


Рисунок 4.27. Карта относительной чувствительности коэффициента фильтрации третьего модельного слоя ко всем трем наборам наблюдений.

Для проведения калибровки с целью сокращения времени, требуемого для вычислений, количество параметров было снижено. По оценкам некоторых исследователей, [66; 106; 109] чрезмерное увеличение количества пилотных точек ухудшает результаты калибровки. В работе Klaas и Imteaz [106] рекомендуется устанавливать шаг между пилотными точками равным 0.1 от размера модели. В данном случае за основу взят размер не всей модели, а области со сравнительно высокой чувствительностью. Кроме того, применение большого количества пилотных точек требует соответствующего охвата наблюдений. В сумме в трех наборах наблюдений имеется 17 скважин: шесть режимных, четыре наблюдательных для откачки 2011 г. и семь наблюдательных для откачки 1998 г.

Показанная на рисунке 4.26 область разделена на 20 прямоугольных участков размером 275×400 м. Каждому из 20 участков соответствовал свой коэффициент фильтрации. Начальные значения коэффициентов фильтрации, как в области анализа неоднородности, так и за ее пределами приняты равными 76 м/сут, по результатам калибровки по схеме однородного пласта. Эту величину можно принять как эффективный коэффициент фильтрации, характеризующий свойства неогенового водоносного горизонта в целом на участке ВПС-4. Вне пределов области анализа неоднородности чувствительность коэффициента фильтрации к наблюдениям слишком низкая, и нет оснований изменять это значение.

Начальные значения коэффициентов фильтрации добавлены в целевую функцию как априорная информация, аналогично модели, описанной в разделе 3.2. Они используются в качестве регуляризатора. Для выбора весового коэффициента для априорной информации конкретных рекомендаций нет. Исходя из опыта калибровки моделей весовой коэффициент подобран таким, чтобы вклад априорной информации в целевую функцию составлял около 10%. Окончательное значение весовых коэффициентов для регуляризирующей составляющей было оценено после первого проведения калибровки и в данном случае составило 2000. Полученная в результате калибровки карта неоднородности представлена на рисунке 4.28, за пределами закрашенной области K_f равен эффективному значению, то есть 76 м/сут.

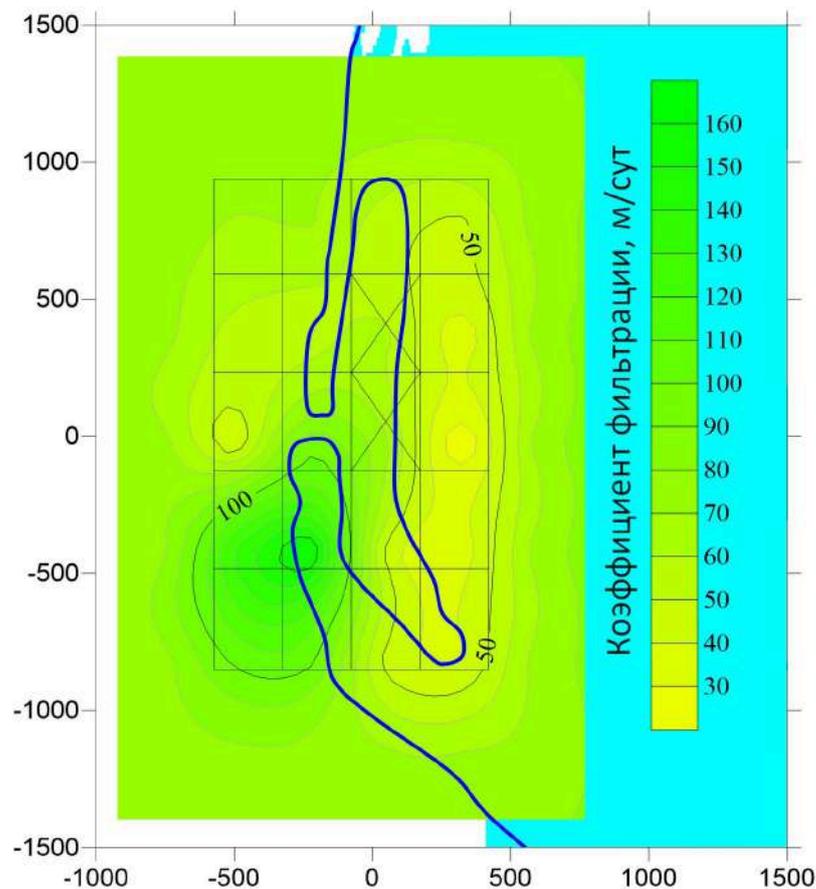


Рисунок 4.28. Карта коэффициента фильтрации третьего модельного слоя, м/сут.

Сравнить достоверность значений параметров, полученных для трех вариантов схематизации водоносного горизонта, можно по формальным критериям, перечисленным ранее в разделе 2.6. Напомним, что в модели, правильно воспроизводящей рассматриваемые процессы, ошибка вычислений не должна зависеть от абсолютного значения модельных величин и должна носить случайный характер [73; 99; 120]. Ошибку модельных вычислений можно оценить по величине невязок уровней/понижений. При этом, для объединения трех используемых наборов требуется учесть весовые коэффициенты. Формула для расчета весового коэффициента (2.5) основана на дисперсии замеров и применяется для расчета целевой функции, в которую входят невязки, возведенные в квадрат (2.1). В рассматриваемом случае все весовые коэффициенты имеют размерность $[м^2]$. Невязки уровней и понижений имеют размерность $[м]$. По этой причине для взвешивания невязок используются квадратные корни весовых коэффициентов, приведенных в таблицах 4.4 и 4.5.

Сравнение приведено на рисунках 4.29, 4.30 и 4.31. Первым вариантом схематизации был однородный пласт, вторым вариантом было разделение водоносного горизонта на две зоны с различной проводимостью, третий вариант – построение пространственной неоднородности. Для построения этих диаграмм использованы результаты моделирования с оптимальными значениями параметров, полученными для каждой схемы соответственно.

На этих рисунках наглядно видно, что результаты моделирования при использовании схемы неоднородного водоносного горизонта ближе к натурным наблюдениям. Ошибка модели однородного пласта носит систематический характер – ошибка возрастает с ростом понижений. Подобные систематические отклонения, в отличие от случайных, свидетельствуют о наличии каких-либо ошибок схематизации. В модели с двумя зонами и с неоднородным водоносным горизонтом неоднородности ошибка носит случайный характер. Кроме того, целевая функция уменьшается более чем в четыре раза для модели неоднородного пласта в сравнении с моделью однородного пласта.

Таким образом, можно заключить, что схема неоднородного пласта лучше отражает природные условия. При этом, по формальным критериям две разные модели неоднородности примерно одинаково воспроизводят имеющиеся наблюдения. Имеющиеся наблюдения не позволяют однозначно выбрать более вероятную схему неоднородности. Однако, применение метода совместной калибровки для каждой из двух рассмотренных схем позволило добиться меньших невязок между расчетными и модельными уровнями, чем раздельное рассмотрение каждого из опытов.

Калибровка моделей производилась с целью дальнейшего расчета прогнозных понижений в водозаборных скважинах в рамках работ по переоценке запасов подземных вод [157]. Схема, использованная для прогнозных расчетов выбрана по формальным критериям.

На рисунках 4.32 и 4.33 приведены гистограммы невязок для двух схем неоднородности. В целом, распределение невязок соответствует нормальному. Результаты калибровки по двум зонам несколько лучше. Средняя невязка составила 0.054 м (0.084 м для пилотных точек), дисперсия составила 3.75 м^2 (4.19 м^2 для пилотных точек). Целевая функция по результатам калибровки по схеме двух зон соответственно ниже, 2.0×10^4 (2.6×10^4 для пилотных точек).

Таким образом, более простая схема неоднородности выглядит более предпочтительной для проведения прогнозных расчетов. Общая прогнозная нагрузка составляет $100\,000 \text{ м}^3/\text{сут}$. Откалиброванная модель водозаборов ВПС 3 и ВПС 4 использовалась для подбора оптимального распределения нагрузки на водозаборные скважины. Подробнее это описано в соответствующем отчете [157].

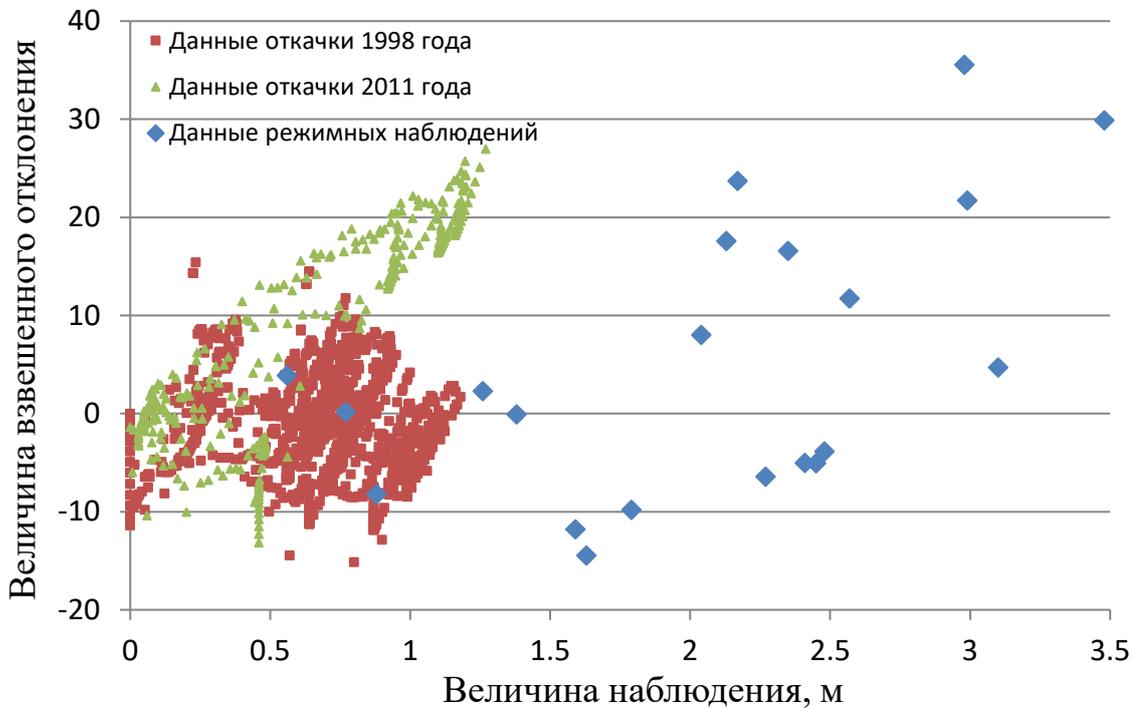


Рисунок 4.29. Зависимость взвешенного отклонения от величины наблюдения для схемы однородного пласта. Значение целевой функции 8.8×10^4 .

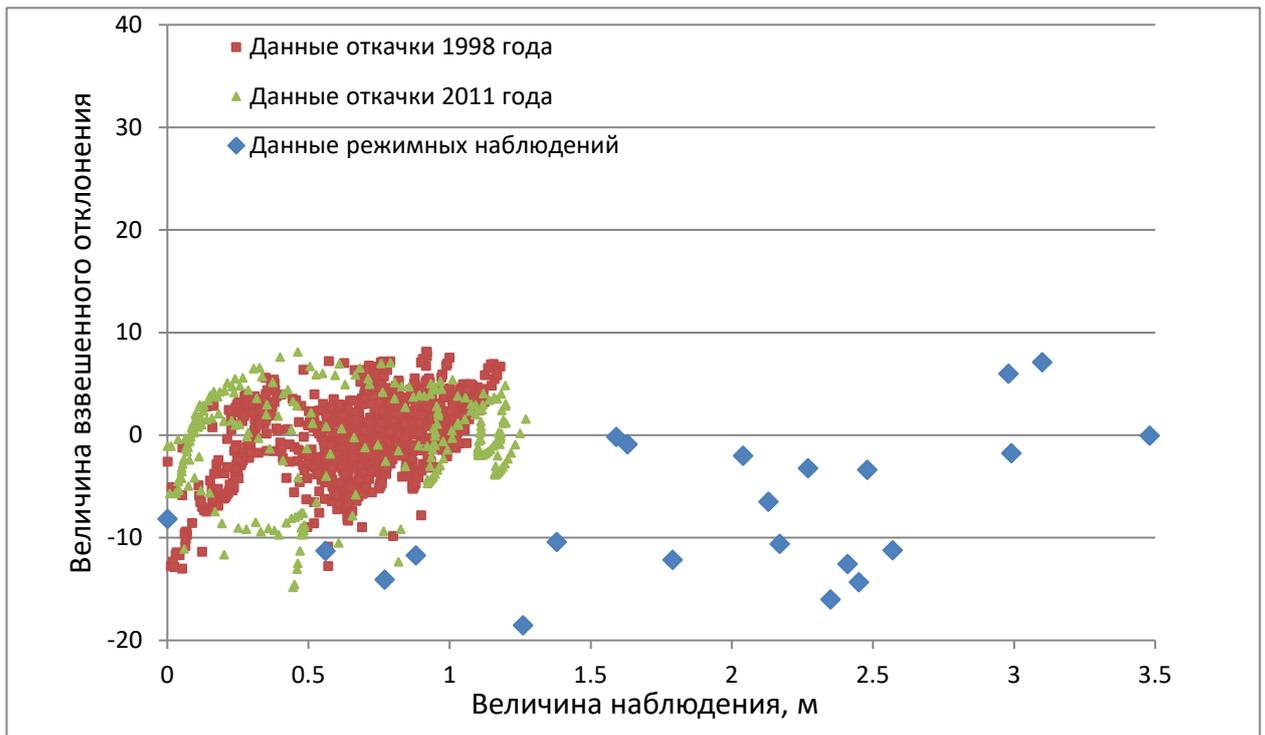


Рисунок 4.30. Зависимость взвешенного отклонения от величины наблюдения для схемы двух зон проводимости. Значение целевой функции 2.0×10^4 .

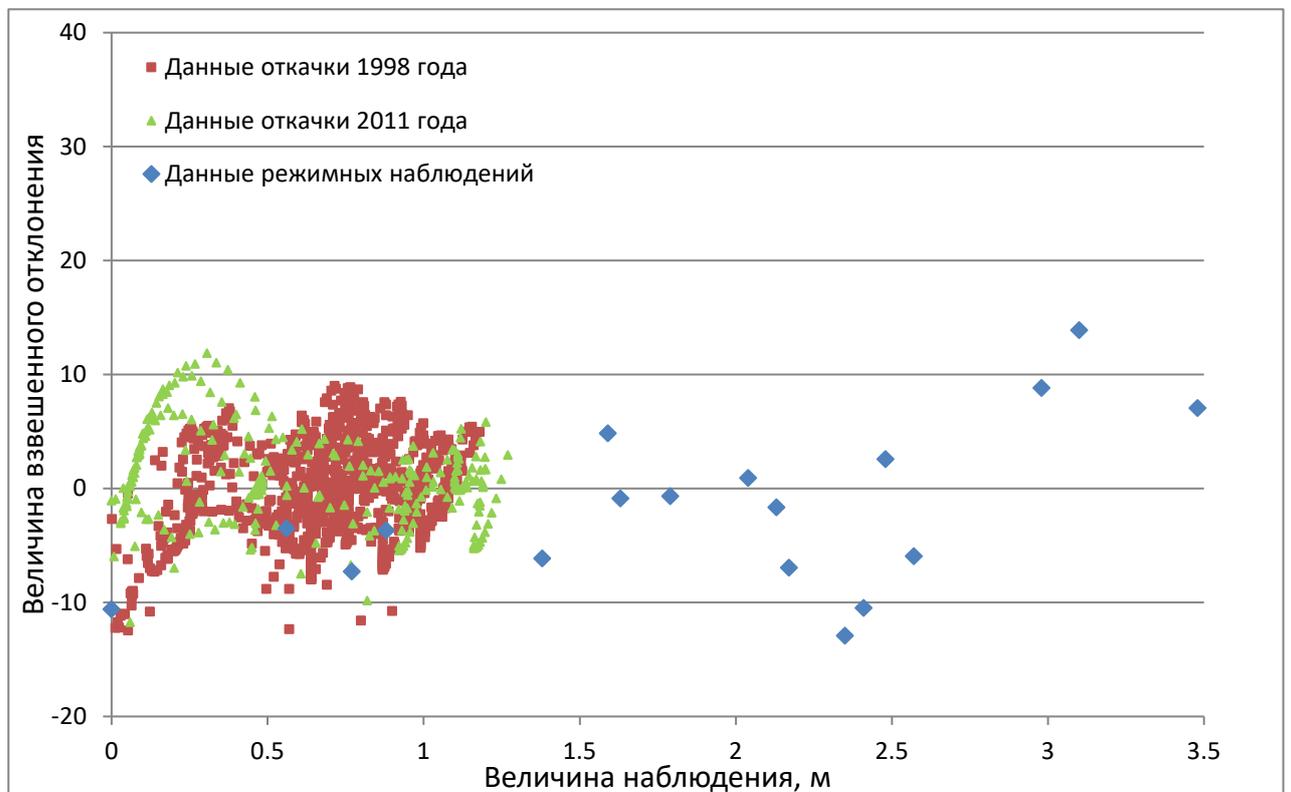


Рисунок 4.31. Зависимость взвешенного отклонения от величины наблюдения для схемы неоднородного пласта. Значение целевой функции 2.6×10^4 .

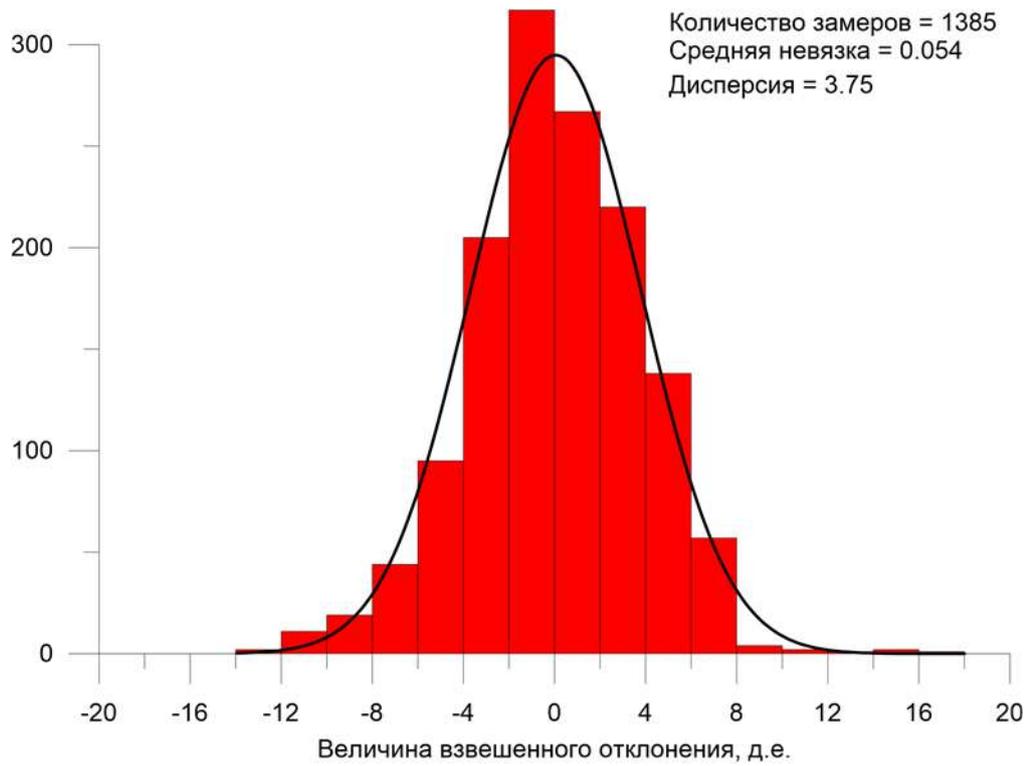


Рисунок 4.32. Гистограмма невязок для схемы двух зон.

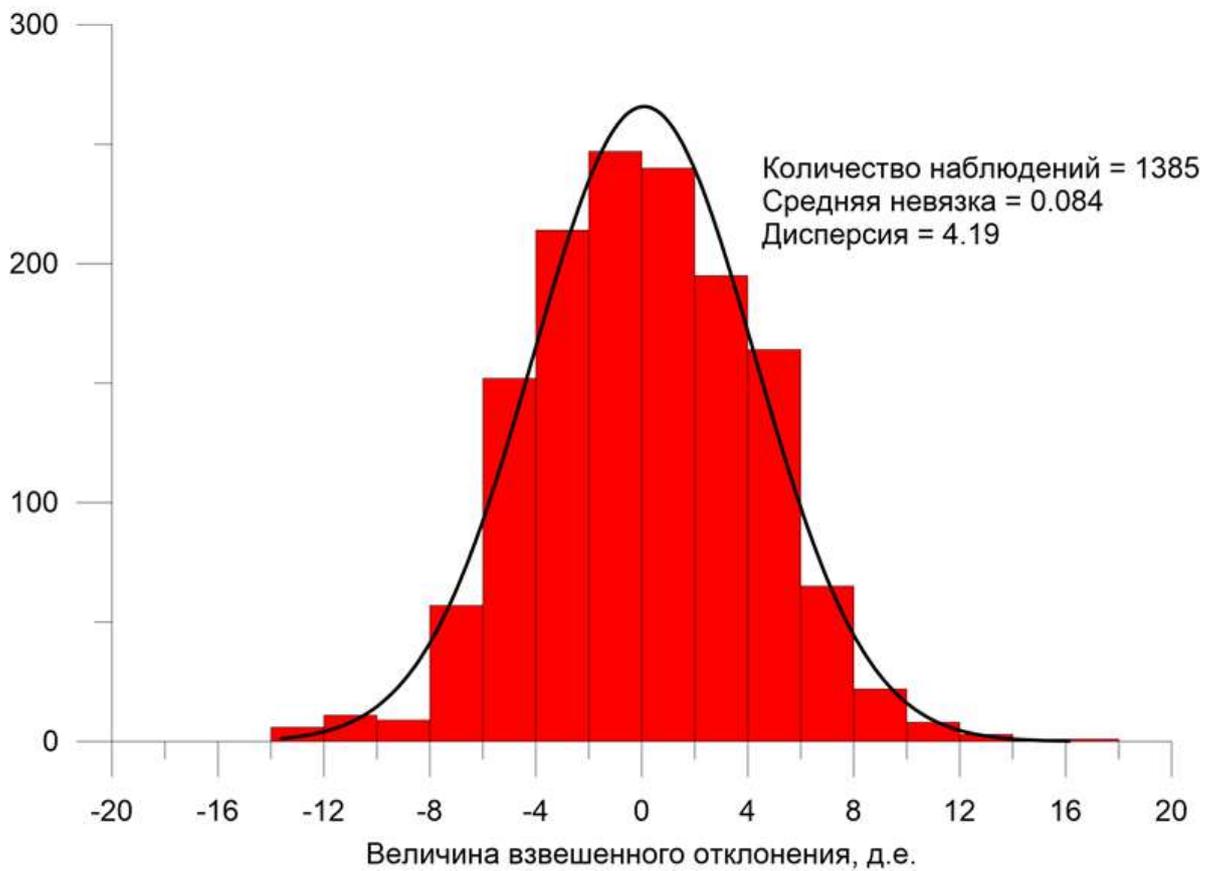


Рисунок 4.33. Гистограмма невязок для метода пилотных точек.

4.3. Выводы по главе 4

1. Определены особенности совместной калибровки разномасштабных моделей одного процесса. Рассмотренные совместно три модели имеют общий набор параметров, но при этом каждая модель имеет отдельный набор наблюдений. За счет этого повышается обобщенная нормированная чувствительность калибруемых параметров, что позволило увеличить их количество и оценить пространственную неоднородность.

2. Применение совместной калибровки позволило согласовать между собой результаты трех разномасштабных типов полевых гидрогеологических исследований (две опытные откачки и режимные наблюдения) и обосновать прогнозную модель для выполнения переоценки запасов, чего не удавалось достичь при использовании стандартного подхода к калибровке. На этой модели было обосновано оптимальное распределение нагрузки на скважины с достижением требуемого суммарного водоотбора.

3. Результаты проведенных исследований позволяют уточнить, изложенную в главе 2 методику, рекомендовав следующий порядок действий при совместной многомодельной калибровке:

- Выбор начальных значений параметров. В данном случае начальные значения оценены с помощью графоаналитической обработки результатов опытных откачек;
- Подготовить все связанные модели (в данном случае - три). Сформировать управляющий файл, обеспечивающий запуск всех моделей;
- Рассчитать весовые коэффициенты для используемых наблюдений;
- Провести анализ чувствительности, выбрать параметры для калибровки;
- Оценить эффективные значения параметров для схемы однородных водоносных горизонтов;
- Оценить необходимость и возможность оценки пространственной неоднородности калибруемых параметров;
- Провести калибровку модели для разных схем неоднородности;
- Для прогнозных расчетов выбрать наиболее вероятный набор параметров.

Глава 5. Применение метода совместной калибровки при разработке геофильтрационных моделей подземного стока бассейнов малых рек

При исследовании взаимосвязи поверхностных и подземных вод в бассейнах малых рек возникает комплекс проблем, связанных с оценкой ущерба речному стоку при организации водоотбора подземных вод и при изучении балансовой структуры разгрузки подземных вод в речных долинах [13]. В условиях, когда сток реки формируется в основном в пределах моделируемого бассейна подземного стока, возникает довольно типичная ситуация, в которой могут быть доступны данные двух типов наблюдений – мониторинга уровня подземных вод и мониторинга приращений меженного стока. В связи с этим, целью данной главы является анализ эффективности метода совместной калибровки при совмещении данных различных типов наблюдений в рамках одной модели.

Анализ проводится на двух примерах моделей бассейнов малых рек. Первый пример – Южно-Воронежское месторождение подземных вод. Наибольший интерес представляет река Хворостань, сток которой может резко сократиться после организации водозаборов. Второй объект – Судогодский водозабор (Владимирская область), расположенный на берегу р. Судогда.

Оценка запасов для водозаборов в речных долинах является одной из типовых задач, для решения которых применяется моделирование. Эксплуатационные ресурсы формируются в пределах речного бассейна. Отбор подземных вод приводит к снижению расхода рек, либо за счет перехвата естественного геофильтрационного потока, либо за счет прямого привлечения воды из реки. Соответственно, при проектировании водозабора требуется учесть его влияние на ближайшие реки. Для решения этой задачи разрабатываются модели, охватывающие весь речной бассейн, либо его значительную часть. Это позволяет учесть естественные геофильтрационные границы, и оценить влияние водоотбора на баланс подземных вод в пределах речного бассейна.

При проведении изысканий на подобных объектах изучаются как подземные, так и поверхностные воды, том числе проводится гидрометрическая съемка. Таким образом, при моделировании водозаборов в речных долинах может быть использовано два типа наблюдений – уровни подземных вод и расходы рек.

5.1. Бассейн р. Хворостань

5.1.1. Описание объекта

Исследование бассейна р. Хворостань связано с оценкой запасов подземных вод для водоснабжения г. Воронежа. Бассейн Хворостани покрывает довольно обширную территорию, расположенную на юго-восток от г. Воронежа, на левобережье р. Дон. Длина реки составляет около 77 км, площадь водосбора – 1080 км². Бассейн Хворостани частично пересекается с территорией Южно-Воронежского месторождения пресных подземных вод (сокращенно ЮВМПВ). Его разведка проводилась в 1976 – 78 годах (поисково-предварительная стадия) и 1979-81 годах (детальная стадия) [161]. Примерные границы месторождения показаны на рисунке 5.1. Государственной комиссией по запасам полезных ископаемых (протокол ГКЗ от 26.02.1982 г. № 8949) были утверждены балансовые эксплуатационные запасы пресных подземных вод водоносного плиоценового комплекса Южно-Воронежского месторождения в количестве 210 тыс. м³/сут.

Предполагается эксплуатация до пяти водозаборных узлов, схема расположения которых приведена на рисунке 5.2. В 2014 – 2016 годах производилась переоценка запасов подземных вод на участке «Водозаборный узел I». Планируемая производительность ВЗУ-I составляет 36 тыс. м³/сут. В рамках этих работ была построена геофильтрационная модель района Южно-Воронежского месторождения. Изучаемый участок частично пересекается с участком междуречья Дон-Воронеж-Усманка, описанным в главе 4. Соответственно, на движение подземных вод влияют в том числе и реки, описанные выше:

- Дон является региональной дреной и крупнейшей из рассматриваемых рек;
- Воронеж и воронежское водохранилище;
- Усманка и ее притоки. В свою очередь, является левым притоком р. Воронеж;
- Икорец и притоки;
- Хворостань и ее притоки.

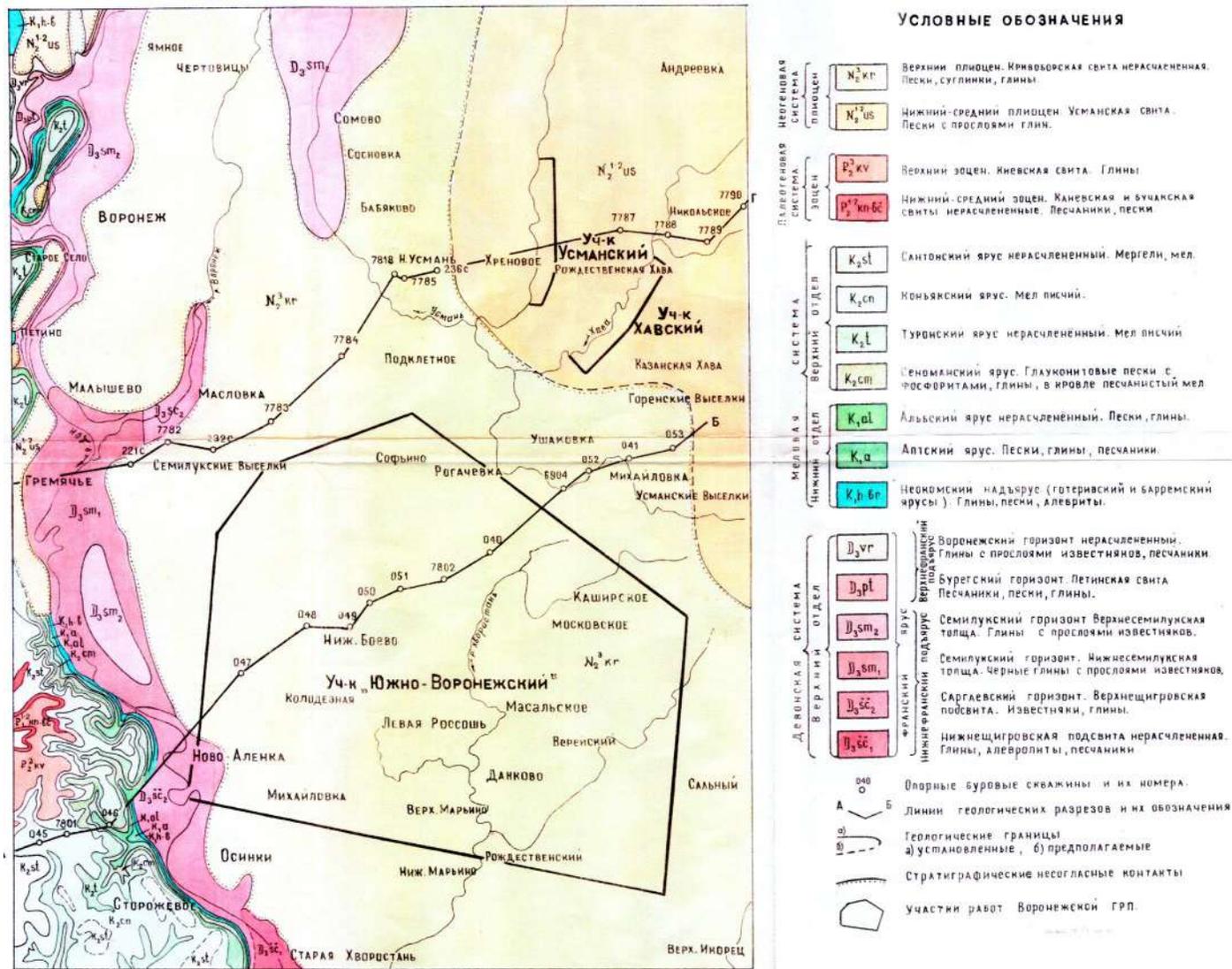
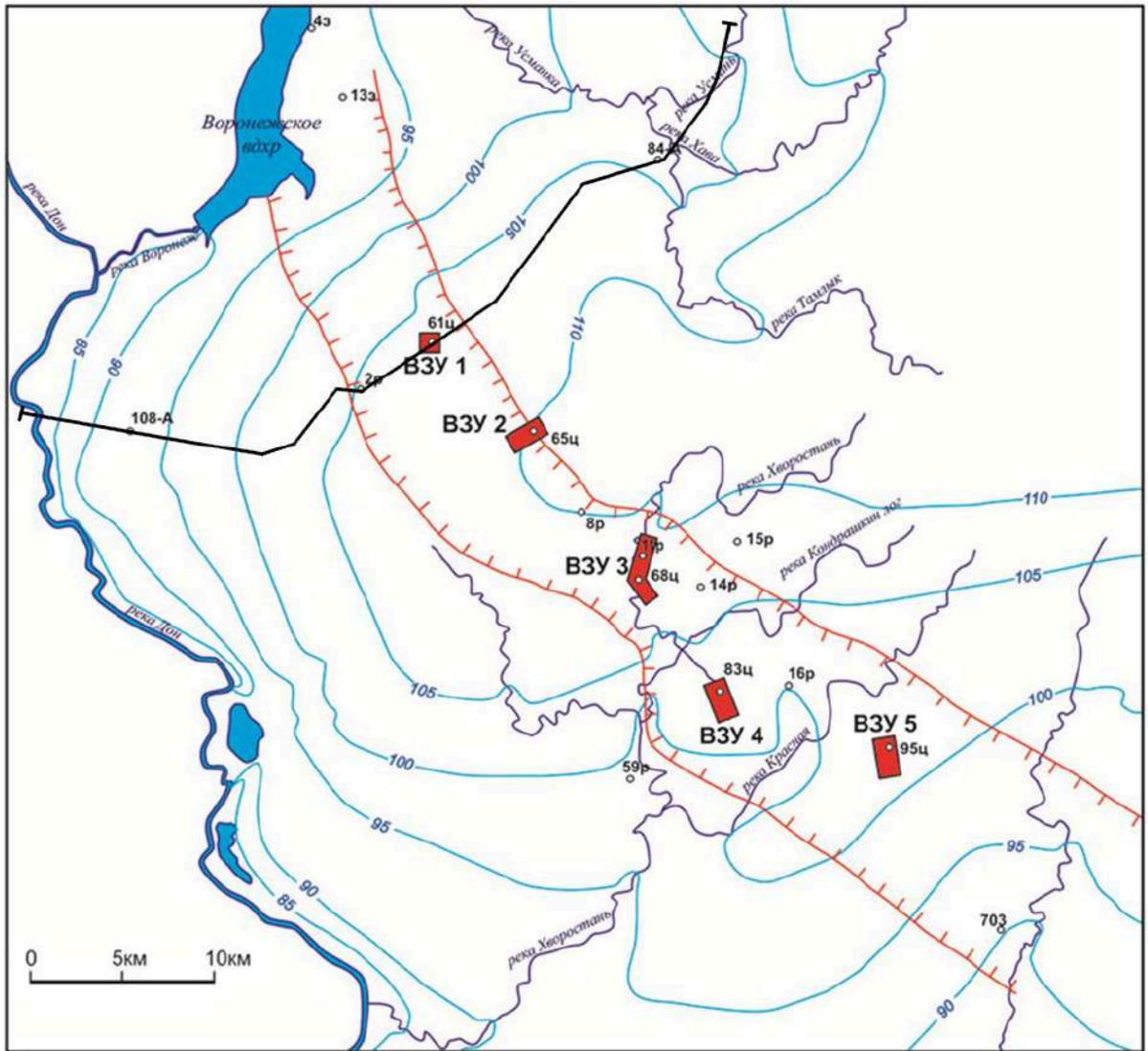


Рисунок 5.1. Схематическая геологическая карта дочетвертичных отложений района Южно-Воронежского месторождения [161].



Условные обозначения

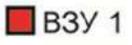
-  Границы переуглубленной части палеодолины р. Дон
-  **ВЗУ 1** Проектируемый водозаборный узел и его номер
-  **83ц** Опорные буровые скважины и их номера
-  90 Гидроизогипсы
-  *река Хворостань* Реки
-  ———— Линия разреза

Рисунок 5.2. Схема расположения перспективных водозаборных узлов.

Бассейн реки Хворостань частично пересекается с Южно-Воронежским месторождением. Исследования природных ресурсов подземных вод Воронежской области [19], показали уязвимость речного стока в ней при интенсивном освоении территории водосбора. В то же время река Хворостань используется местным населением в течение периода активных сельскохозяйственных работ. Соответственно, необходимо оценить влияние, которое окажет отбор подземных вод для водоснабжения г. Воронежа на ее сток.

Как и на участке ВПС-4 (см. главу 4) основной водоносный комплекс в районе исследований – плиоценовый комплекс неогеновой палеодолины Дона [46]. Важным структурным элементом является переуглубленная часть палеодолины (см. рисунки 5.2 и 5.3). Плиоценовые отложения представляют собой пески различной степени зернистости, наиболее крупные – в переуглубленной части долины, с крупным галечником в основании толщи. Мощность водовмещающих пород в переуглубленной части палеодолины достигает 50 м, к бортам уменьшается до 10–20 м.

Подстиляется плиоценовый водоносный комплекс девонскими терригенно-карбонатными отложениями. В верхней части девонских отложений залегает слабопроницаемый глинистый горизонт, распространенный за пределами переуглубленной зоны палеодолины. В пределах переуглубленной зоны семилукские глины размыты, неогеновый аллювий залегает на слабопроницаемой толще.

Неогеновые пески практически на всей площади распространения в верхней части разреза сменяются глинами, которые изолируют плиоценовый водоносный комплекс от вышележащих четвертичных водоносных горизонтов. Однако в долине Хворостани неогеновые глины и вышележащие четвертичные отложения ранне- и среднеплейстоценового возраста размыты, и степень связи плиоценового комплекса с рекой определяется фильтрационным сопротивлением донных отложений Хворостани. Вследствие этого важным представляется изучить состав донных отложений реки и степени их неоднородности на участке предполагаемого водоотбора.

Освоение Южно-Воронежского месторождения, вероятно, повлияет на режим реки Хворостань. Заведомо повлияют перспективные водозаборы ВПС-3 и ВПС-4. В пределах бассейна р. Хворостань нет действующих или действовавших гидрологических постов сети Росгидромета, что позволило бы охарактеризовать многолетнюю динамику общего стока и его составляющих.

Последние известные опубликованные единичные замеры расхода р. Хворостани проводились в летние межени 2005 и 2006 гг. сотрудниками Воронежского государственного университета [19]. Расход измерялся на временно оборудованных гидропостах в селах Данково (2 поста) и Добрино, а также в устье Хворостани. Для изучения разгрузки подземных вод в бассейне реки Хворостань сотрудниками кафедры гидрогеологии геологического факультета МГУ им. М.В. Ломоносова в 2014-2019 гг. были проведены гидрометрические измерения. Измерения производились на 6 (в 2014 г.) и 7 временных створах. В замыкающем створе № 5 измеренный расход изменялся в интервале 474–700 л/с. По более ранним оценкам [19], расходы на устье реки составили 1240 и 1100 л/с в 2005 и 2006 г. соответственно.

В таблице 5.1 приведены расходы в замыкающем створе, замеренные в летнюю межень, и сумма осадков за май–август для каждого года. Из данных таблицы 5.1 следует, что различие расходов в замыкающих створах, по-видимому, связано с различием выпавшего в летний период количества осадков, влияющих на формирование летней межени. По оценкам, приведенным в работе [19], минимальный летний 30-суточный расход 50%-ной обеспеченности на замыкающем створе должен составлять 920 л/с, а с 95%-ной обеспеченностью – 190 л/с. Отметим, что полученные в указанной работе оценки базировались всего на двух замерах расходов Хворостани и привлечении данных гидропоста на р. Усмань в качестве аналога. Такое ограниченное количество наблюдений не позволяет считать оценку 95%-ной обеспеченности достаточно достоверной. Поэтому для дальнейших модельных исследований был принят минимальный фактический измеренный расход, а именно данные 2014 г.

Посты, по возможности, распределены равномерно вдоль русла реки от истока с постоянным течением (с. Мосальское) до устья (см. рисунок 5.4). Дополнительный створ 2а был оборудован в 620 м ниже по течению от впадения в реку притока Сухая Хворостань для оценки расхода, привносимого притоком, так как непосредственно в месте впадения притока в реку местность очень заболочена. Измерения проводились в августе, в период летней межени, когда весь сток реки формируется за счет разгрузки подземных вод. В результате измерений получены значения расхода реки (Q) на створах, абсолютное (ΔQ) и удельное (Δq) на единицу длины русла приращение между створами (Таблица 5.2). Измерения показали, что наибольшее приращение расхода на 1 км длины русла наблюдается между створами 2–2а–3. На участке 2–2а в р. Хворостань впадает р. Сухая Хворостань в русле которой течение отсутствует большую часть года. На участке 2а–3 приращение расхода р. Хворостань возможно только за счет разгрузки подземных вод.

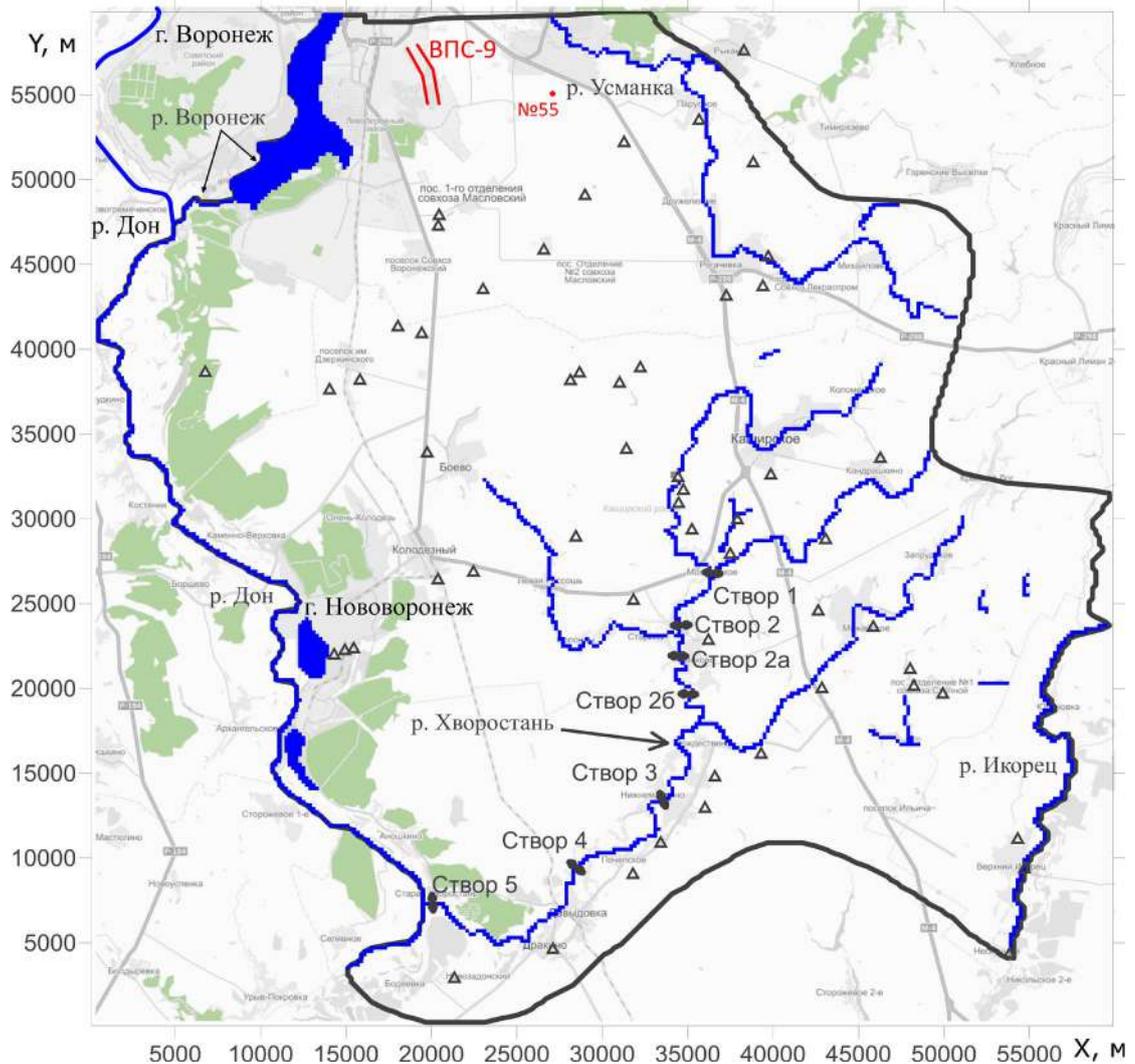


Рисунок 5.4. Схема расположения наблюдательных скважин и гидрометрических створов. Координаты указаны в пространстве модели.

Таблица 5.1. Измеренные расходы реки Хворостань в летнюю межень и количество осадков.

Год	Измеренный расход в замыкающем створе, л/с	Сумма осадков по метеостанции Воронеж за май-август, мм
2005	1240*	162
2006	1100*	140
2014	474	191
2016	675	223
2017	700	195
2018	1030	176
2019	820	229
Среднее за 2014-2019г	740	234

* По данным Зинюкова Ю.М. [19].

Таблица 5.2. Результаты гидрометрических измерений на р. Хворостань.

№ створа	Расстояние между створами. км	Значение расхода реки на створе (Q) и удельного приращения расхода реки на 1 км длины русла (Δq)									
		03-04.08.2014 г.		06.08.2016 г.		14.08.2017 г.		03.08.2018 г.		03.08.2019 г.	
		Q, л/с	Δq , л/с·км	Q, л/с	Δq , л/с·км	Q, л/с	Δq , л/с·км	Q, л/с	Δq , л/с·км	Q, л/с	Δq , л/с·км
C1	8	9	7.5	13	8	15	9	106	9.5	Створ затоплен	---
C2	1	69	51	77	65	86	65	182	111	136	72
C2a		120		142		151		293		208	
C2б	3.5	---	13	229	25	234	24	304	3.14	184	1.3
	12										
C3	7.8	322	9	408	14	427	19	556	18.5	345	24.2
C4		391		516		574		700		534	
C5	16.6	474	5	675	10	700	8	1030	19.9	820	17.2

Исследования донных отложений посредством ручного бурения показали, что на участках всех створов они представлены тугопластичными, плотными глинами значительной мощности с незначительными (до 10 см) песчано-глинистыми прослоями. На участке, расположенном ниже впадения Сухой Хворостани, песчаная составляющая существенно увеличивается. Таким образом, в районе центральной части с. Данково явно выделяется участок, в пределах которого возможно снижение фильтрационного сопротивления донных отложений («гидродинамическое окно»). На этом участке расход разгрузки плиоценового водоносного комплекса в Хворостань повышен относительно остального русла. Подчеркнем, что данный участок расположен в перспективной области для размещения водозаборного узла ВПС-3, который при эксплуатации окажет существенное влияние на разгрузку подземных вод в Хворостань.

Для выявления и оконтуривания гидродинамических окон в 2015 г. были проведены геофизические исследования на участке наибольшего приращения расхода реки (в с. Данково). В их результате определили отрезок русла, расположенный в 880 м ниже устья Сухой Хворостани, в пределах которого отмечается резкая аномалия значений для всех геофизических показателей: снижение температуры речной воды с 17 до 9 °С, резкое увеличение удельного электрического сопротивления с 9,5 до 12 Ом·м и положительная аномалия ЕП [24]. Такие изменения возможны только в связи с разгрузкой более холодных и менее минерализованных вод. Наличие гидродинамического окна также подтверждается электротомографией разреза: на этом участке отмечено значительное сокращение интегральной мощности глинистых пород в донных отложениях.

Отметим, что геофизические измерения относятся к косвенным методам, требующим подтверждения данными прямых методов. Эта задача решалась постановкой дополнительного гидрометрического створа 2б в с. Верхнемарьино. Детализация гидрометрических замеров в районе с. Данково в последующие годы показала, что на участке между створами 2 и 2а, на который приходится гидродинамическое окно в донных отложениях, удельное приращение расхода, рассчитанное на 1 км длины русла, оказывается значительно больше, чем на остальных створах (таблица 5.2). Удельное приращение расхода реки на участке между створами 2а и 2б также выше, чем на других участках русла.

Важная особенность гидрогеологического разреза территории в районе с. Данково – гидрогеохимическая инверсия, наблюдаемая в верхней части разреза и связанная с загрязнением грунтовых вод в процессе сельскохозяйственной деятельности. Плиоценовый водоносный комплекс вследствие своей относительной изолированности от вышележащих горизонтов в значительно меньшей степени подвержен загрязнению сверху. Он содержит преимущественно гидрокарбонатные кальциевые или натриево-кальциевые воды с

минерализацией 0,3–0,8 г/л с жесткостью в пределах ПДК. Проведенное в 2015–2017 гг. гидрогеохимическое обследование показало, что минерализация грунтовых вод меняется в зависимости от времени опробования, но всегда превышает 1 г/л, увеличиваясь в отдельных пробах до 2 г/л. Практически во всех пробах общая жесткость превышает ПДК. Кроме того, в компонентном составе отмечено высокое содержание сульфатов (до 3 мг-экв/л и более) и натрия, причем иногда натрий преобладает. Ввиду того, что Хворостань – основная дрена грунтовых горизонтов – состав ее воды напрямую связан с составом грунтовых вод, а минерализация речных вод служит индикатором возможной разгрузки в реку плиоценового комплекса. Гидрохимическое обследование реки заключалось в отборе проб воды в пределах с. Данково от его северной окраины до створа 2б в с. Верхнемарьино с учетом установленного с помощью геофизических методов гидродинамического окна. Опробования показали, что выше гидродинамического окна минерализация воды находилась в пределах 1,15 г/л, в области окна понижалась до 0,93 – 0,95 г/л, сохраняясь около 1 г/л (в течение всего периода опробования) вниз по течению еще на 1,5 км, а далее опять повышалась до 1,05 г/л. Такое распределение может быть связано только с поступлением в реку подземных вод относительно защищенного от поверхностного загрязнения плиоценового комплекса.

Таким образом, в результате гидрогеологических и геофизических работ вдоль р. Хворостань подтверждено наличие в ее донных отложениях фильтрационного окна. В пределах этого окна осуществляется разгрузка плиоценового водоносного комплекса в реку.

5.1.2. Описание модели

Для описания Южно-Воронежского месторождения подземных вод была разработана региональная геофильтрационная модель. Размеры региональной гидрогеодинамической модели определялись необходимостью учесть региональную дрена (р. Дон) и охватить весь бассейн р. Хворостань. В плане размер территории исследования составил 60×60 км. Поток подземных вод формируется за счет местной инфильтрации и разгружается в местные и транзитные водотоки. В гидрогеологическом отношении известно, что местный поток подземных вод формируется в горизонтах и комплексах неоген-четвертичной водоносной толщи, подстилаемой слабопроницаемыми семилукскими девонскими глинами. Этот комплекс взаимодействует путем перетекания с водоносными горизонтами и комплексами в хорошо проницаемых девонских известняках (водоносный саргаевско-нижнесемилукский комплекс и др.).

Региональную структуру потока подземных вод в районе Южно-Воронежского месторождения можно охарактеризовать как плано-пространственную. Учитывая, что неоген-четвертичный пласт содержит в разрезе ряд слабопроницаемых прослоев, включая

плиоценовые глины, а водозаборные скважины, предположительно, будут вскрывать его нижнюю, неогеновую, часть для целей моделирования этот комплекс целесообразно разбить на два слоя. Таким образом, можно провести следующую схематизацию геологического строения.

Структура. Первый модельный слой включает водоносные горизонты четвертичного возраста. Второй модельный слой – водоносный плиоценовый комплекс. Граница между этими слоями проводится по подошве четвертичных отложений. Третий модельный слой соответствует слабопроницаемым отложениям семилукских глин, четвертый – водоносным горизонтам и комплексам в девонских отложениях.

Граничные условия. Внешние границы модели определялись с учетом динамики естественного потока в основном водоносном комплексе и крупных водотоках. Для выделения границ, в том числе, использована карта подземного стока Центральной и Восточной Европы в масштабе 1:1 500 000. Кроме того, учитывалась воронка депрессии, сформированная в результате работы городского водозабора ВПС-9 [37], который расположен севернее моделируемой области в схожих условиях (показан на рисунке 5.4). При выделении границ были использованы два контура, которые совпадают с естественными границами потока подземных вод: на западе – реки Воронеж (Воронежское водохранилище) и Дон, на юго-востоке – р. Икорец (рисунок 5.4). На остальных участках граница проведена по предполагаемым линиям тока в неоген-четвертичном водоносном пласте, она рассматривается как непроницаемая. Гидрографическая сеть, расположенная в пределах модели (реки Усманка, Хворостань, пруды и озера), рассматривается как внутренние границы.

Параметры. Подробное описание модели приведено в отчете [153], в написании которого автор данной работы принимал непосредственное участие. Здесь приводится краткая характеристика параметризации. Начальные значения модельных параметров и конфигурация зон неоднородности основывается на материалах отчета 1981 г [161].

Коэффициенты фильтрации:

- В соответствии с картой четвертичных отложений выделено 3 зоны для первого модельного слоя с различными значениями K_f в горизонтальном направлении, диапазон значений 2 – 20 м/сут;
- Два значения K_f первого слоя в вертикальном направлении, 0.1 и 0.001 м/сут;
- Карта K_f второго слоя построена путем интерполяции значений, полученных при обработке кустовых откачек, известных из отчета [161]. Для работы с горизонтальным K_f второго слоя использован метод пилотных точек – всего учтено 12 откачек, каждой

откачке поставлен в соответствие один параметр. Диапазон изменения составляет 25 – 75 м/сут;

- Для вертикального K_f второго слоя выделено две зоны. На всей площади модели задано значение вертикального K_f равное 0.05 м/сут кроме долин рек Дон и Икорец, в которых значение вертикального K_f задано равным 0.5 м/сут;
- Коэффициенты фильтрации третьего модельного слоя заданы в соответствии с распространением семилукских глин в кровле девонских отложений. Вертикальный и горизонтальный K_f приняты равными Глинам задан K_f , равный 0.001 м/сут, в области их размыва третий слой задан с фиктивной мощностью 0.1 м и K_f , равным 0.01 м/сут;
- Четвертый модельный слой соответствует известнякам, поэтому для него задана проводимость. Изучение фильтрационных свойств девонских известняков практически не проводилось. Они эксплуатируются некоторыми скважинами водозаборов г. Нововоронежа, и для этого участка известно, что проводимость составляет приблизительно 1000 м²/сут [149]. Информации о девонских отложениях на всей остальной территории нет. Нововоронежские водозаборы располагаются в современной долине р. Дон. Предполагается, что на водораздельном пространстве проводимость девонских известняков ниже на порядок. В модель задана карта проводимости, в которой выделено две зоны со значениями 100 и 1000 м²/сут и переходный участок между этими зонами, в котором проводимость линейно зависит от мощности. По сути, вся карта проводимости является одним параметром, принятым в таком виде ввиду отсутствия необходимых фактических данных. При необходимости подбора проводимости четвертого слоя, калибруемым параметром может являться один коэффициент, множитель, на который должна быть умножены значения в каждом модельном блоке;
- Вертикальных коэффициентов фильтрации четвертого слоя задано два, в соответствии с распространением семилукских глин в кровле известняков.

Инфильтрационное питание: в соответствии с картой почв выделено пять зон с различным инфильтрационным питанием, начальные значения приняты по отчету [150].

Проводимость донных отложений:

- Реки Дон, Икорец, Усманка, Тамлык и Воронежское водохранилище имеют отдельные значения проводимости донных отложений, одинаковые вдоль всего русла;
- Притоки р. Хворостань имеют единое значение проводимости донных отложений;
- На р. Хворостань между гидрометрическими створами выделено три протяженных участка русла с различными значениями проводимости, а также незначительное по протяженности фильтрационное окно, выявленное геофизическими методами [24].

Водоотдача:

- Гравитационная водоотдача первого слоя принята равной 0.1 как среднее по имеющимся определениям;
- Гравитационная водоотдача второго слоя принята равной 0.11 как минимальная из известных определений;
- Упругая водоотдача второго слоя принята равной 1×10^{-3} по результатам обработки кустовых откачек;
- Упругая водоотдача третьего слоя (семилюкских глин) не известна и принята численно равной значению для четвертого слоя (девонских известняков). По результатам изысканий она принята и равной 1.5×10^{-3} .

Всего 26 различных параметра K_f , 5 параметров питания, 10 параметров проводимости донных отложений и 4 параметра водоотдачи, итого 45 параметров.

5.1.3. Выбор параметров для калибровки

Разработанная модель должна отвечать двум критериям. Во-первых, модель должна адекватно воспроизводить региональный поток подземных вод для прогнозирования работы водозаборов. Во-вторых, модель должна воспроизводить взаимодействие р. Хворостань с подземными водами для оценки потенциального ущерба речному стоку.

Для верификации модели использовано два набора данных. Первый набор данных – это одновременные замеры напоров подземных вод в разведочных наблюдательных скважинах при разведке ЮВМППВ [161] и участков Нововоронежских водозаборов [149]. Все наблюдательные скважины вскрывают плиоценовый водоносный комплекс, который соответствует 2-му модельному слою. Расположение использованных наблюдательных скважин приведено на рисунке 5.4.

Второй набор данных – результаты гидрометрии, проведенной на р. Хворостань сотрудниками кафедры гидрогеологии в 2014 – 2019 г. (Таблица 5.2). Гидрометрические измерения производились в летнюю межень, предполагается, что увеличение расхода реки определяется исключительно разгрузкой подземных вод.

Измерения в разведочных скважинах ЮВМППВ проводились в 1979 – 1980 г. Обследование Нововоронежских водозаборов произведено в 2001 г. На участке ЮВМППВ не существует достаточно длительных режимных наблюдений за естественными уровнями подземных вод, которые бы позволили привести замеры из одного временного периода к замерам другого временного периода. В такой ситуации есть три варианта:

- Использовать замеры из одного временного периода и исключить из рассмотрения остальные. Это означает исключение из рассмотрения расходов реки и невозможность оценить параметры р. Хворостань;
- Рассматривать замеры из различных временных периодов по отдельности. Это, вероятно, может позволить выявить различия в факторах, определяющих режим подземных вод. А именно – изменение инфильтрационного питания и сопротивления донных отложений в реках во времени. Для реализации этого варианта необходимо, чтобы замеры уровней и расходов совпадали во времени;
- Рассматривать все имеющиеся данные совместно. Имеющиеся замеры выполнены в разные периоды, без пересечений по времени. Таким образом на модели возможно будет воспроизвести некоторое стационарное состояние подземных вод, но невозможно обосновать, что это будет именно среднегодовое состояние.

Целью разработки описываемой модели является прогнозирование работы перспективных водозаборных узлов. В том числе, требуется оценка возможного сокращения стока р. Хворостань. По этой причине для работы над моделью выбран третий вариант – совместное использование всех имеющихся замеров при моделировании стационарного геофильтрационного потока. При этом возможно воспроизвести на модели условия минимальной водности (на 2014 год) для оценки минимального остаточного стока р. Хворостань при эксплуатации перспективных водозаборных узлов. Использование замеров уровней за другой временной период (1979 – 1980 г.) возможно при учете амплитуды внутригодовых и многолетних колебаний.

При начальных значениях параметров расчетные уровни и расходы реки не соответствуют фактическим, что показано на рисунках 5.5 и 5.6. Следовательно, для разработанной модели требуется проведение калибровки. Для проведения автоматической калибровки путем минимизации целевой функции (2.1) имеется две группы наблюдений – уровни подземных вод и расходы реки Хворостань. Всего использовано 67 наблюдательных скважин и 6 гидрометрических постов, итого 73 замера.

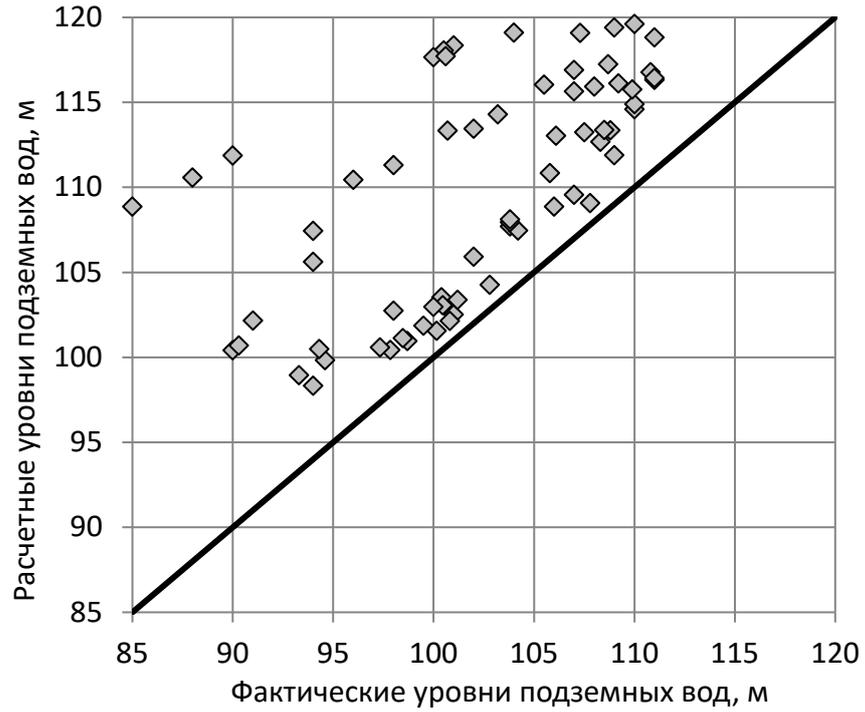


Рисунок 5.5. Сопоставление расчетных и фактических уровней подземных вод при начальных значениях параметров.

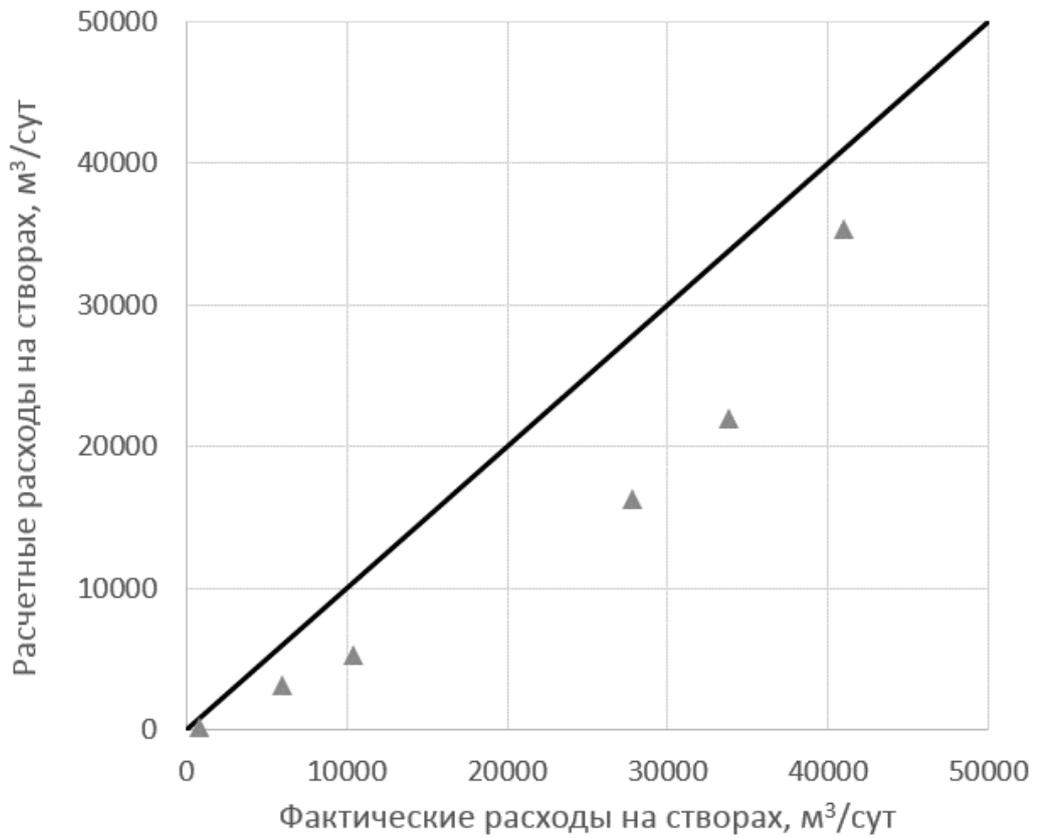


Рисунок 5.6. Сопоставление расчетных и фактических расходов при начальных значениях параметров.

Поскольку используются разновременные замеры, заведомо ожидаются большие невязки между расчетными и фактическими величинами. Как указано в разделе 2.1, общая дисперсия для каждого замера складывается из дисперсий каждого из факторов. В рассматриваемом случае, при объединении разновременных замеров, есть три составляющие: собственно ошибка измерения $\sigma_{и}$ и дисперсия, обусловленная внутригодовыми ($\sigma_{вг}$) и многолетними ($\sigma_{мл}$) колебаниями. Запишем выражение для суммарной дисперсии аналогично (2.4):

$$\sigma^2 = \sigma_{и}^2 + \sigma_{вг}^2 + \sigma_{мл}^2$$

Оценим эти составляющие. На участке водозабора ВПС-9 велись режимные наблюдения, на рисунке 5.7 показаны имеющиеся в распоряжении автора замеры уровней по наблюдательной скважине №55 (ее расположение показано на рисунке 5.4). Она выбрана как наиболее удаленная от водозабора ВПС-9 режимная скважина и, следовательно, наименее подверженная влиянию колебаний его дебита. Измеренные минимальный и максимальный уровни в скважине различаются на 1.77 м. По имеющимся данным, амплитуда внутригодовых колебаний уровня достигает 0.7 м.

Дисперсия внутригодовых колебаний равна 0.18 м^2 , многолетних – 0.10 м^2 . В сравнении с этими величинами дисперсией собственно измерений (10^{-4} м^2) можно пренебречь. Общая дисперсия для замеров уровней σ_H^2 равна 0.28 м^2 . Как указано выше, общее количество замеров $M_o = 73$, количество замеров уровней $M_H = 67$. На данном этапе определения весов нет оснований разделять поправочные коэффициенты α для двух групп наблюдений, и они равны между собой: $\alpha = 0.5$ д.е. Таким образом, весовой коэффициент для уровней согласно формуле

$$(2.5) \text{ равен } \omega_H = \alpha_H \frac{M_o}{M_H \sigma_H^2} = 0.5 \frac{73}{67 \times 0.28} = 1.95 \text{ м}^2.$$

Для рек очевидно, что величина ошибки (и дисперсии) будет зависеть от величины расхода. Соответственно, весовой коэффициент должен быть рассчитан отдельно для каждого замера. Оценка точности разовых гидрометрических измерений трудно выполнима. Для измерений гидрометрической вертушкой в реках с зарастающим руслом в учебнике «Гидрометрия» [23] предлагается принять погрешность в 6%. Приведем расчет весового коэффициента ω_Q для расхода на замыкающем створе (№5). Расход 474 л/с равен $40954 \text{ м}^3/\text{сут}$. Погрешность в 6% соответствует стандартной ошибке $2457 \text{ м}^3/\text{сут}$, дисперсия, соответственно, равна $6.04 \times 10^6 \text{ м}^6/\text{сут}^2$. Имея в виду, что общее количество замеров расхода $M_Q = 6$ и обозначив дисперсию расхода как $\sigma_{Q_i}^2$: $\omega_Q = \alpha_Q \frac{M_o}{M_Q \sigma_{Q_6}^2} = 0.5 \frac{73}{6 \times 6.04^7} = 1.01 \times 10^{-6} \text{ м}^2$.

С указанными значениями весовых коэффициентов была проведена оценка чувствительности модели к изменению параметров.

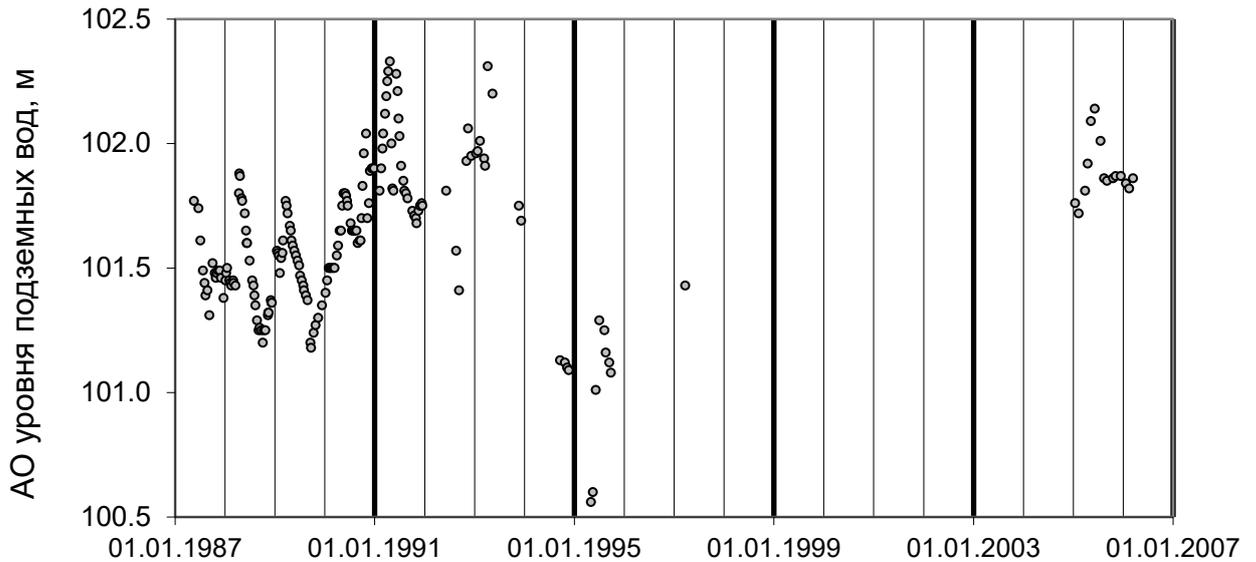


Рисунок 5.7. График изменения уровня воды в наблюдательной скважине №55.

Таблица 5.3. Весовые коэффициенты для расхода р. Хворостань по створам.

Номер створа	Расход		Стандартная ошибка, м ³ /сут	Дисперсия, м ⁶ /сут ²	Весовой коэффициент, сут ² /м ⁶
	л/с	м ³ /сут			
1	9	778	46.7	2.18×10^3	2.79×10^{-3}
2	69	5962	357.7	1.28×10^5	4.75×10^{-5}
2а	120	10368	622.1	3.87×10^5	1.57×10^{-5}
3	322	27821	1669.2	2.79×10^6	2.18×10^{-6}
4	391	33782	2026.9	4.11×10^6	1.48×10^{-6}
5	474	40954	2457.2	1.68×10^6	1.01×10^{-6}

Из 45 перечисленных выше (раздел 5.1.2) параметров, емкостные параметры откалибровать заведомо невозможно, поскольку моделируется стационарный режим. Кроме того, не калибруется проводимость фильтрационного окна на р. Хворостань и ее притоков, большинство из которых являются временными водотоками. Для остальных параметров (всего 39) произведен расчет чувствительности (как описано в разделе 2.2).

Принята следующая система обозначений:

- $ГК_{\phi}$ и $ВК_{\phi}$ обозначают горизонтальный и вертикальный коэффициенты фильтрации соответственно. Номера двойные, первая цифра обозначает номер слоя, вторая – номер параметра в пределах слоя;
- W – инфильтрационное питание. Цифра обозначает номер зоны;
- Проводимость донных отложений обозначена названием реки. Для Хворостани сегменты пронумерованы от истока к устью.

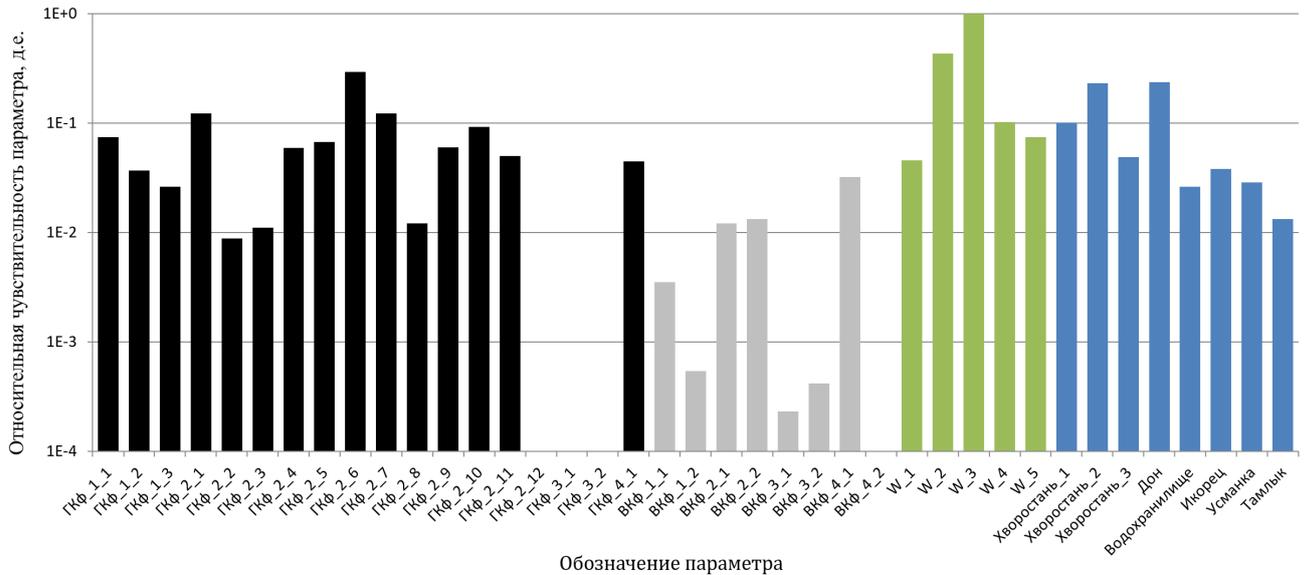


Рисунок 5.8. Сравнение чувствительности параметров модели.

Рассчитанные значения чувствительности параметров были нормированы, то есть пропорционально изменены таким образом, чтобы максимальное значение чувствительности было численно равно единице. Графически относительные значения чувствительности показаны на рисунке 5.8 (ось абсцисс логарифмическая). Различные группы параметров обозначены различными цветами. Максимальную чувствительность имеют параметры инфильтрационного питания. Чувствительность горизонтальных коэффициентов фильтрации и значений проводимости донных отложений несколько ниже. Почти все вертикальные коэффициенты фильтрации имеют чувствительности менее 0.01 от максимальной.

Следует отметить, что коэффициент фильтрации основного водоносного пласта – модельного слоя 2 – изучен при помощи кустовых откачек, поэтому можно предположить, что заданная в модели карта горизонтального коэффициента фильтрации этого слоя обоснована лучше, чем значения прочих модельных параметров. С учетом этого предположения и значений чувствительности для автоматической калибровки выбраны значения инфильтрации и проводимости донных отложений. Значения инфильтрационного питания калибровались для всех 5 зон. Проводимость донных отложений калибровалась не для всех рек. Для калибровки была выбрана река Хворостань, поскольку для нее известно изменение расхода вдоль русла. Также в автоматическую калибровку включены параметры донных отложений реки Дон, поскольку она является основной дренажной моделью потока. Это подтверждают значения чувствительности: чувствительность четырех выбранных параметров (3 для Хворостани и единая величина проводимости для Дона) превышает чувствительность проводимости прочих водотоков. Таким образом, в результате анализа чувствительности количество калибруемых параметров было сокращено до девяти.

5.1.4. Калибрация модели

Для сравнения расчетных и фактических уровней использованы следующие критерии:

- Составляющая уровней в целевой функции. Сама по себе не является показателем «качества» калибровки, однако взвешенная сумма квадратов является удобным и наглядным показателем результативности калибровки. Как описано в главе 2, в процессе калибровки величина целевой функции должна снижаться, и в идеальном случае ее значение должно равняться 0;
- Нормальное распределение невязок и отсутствие систематического отклонения;
- Средняя невязка в метрах. Вычисляется как среднее арифметическое всех невязок с учетом знака. На модели, адекватно воспроизводящей геофильтрационный поток, отклонения «в плюс» должны быть равны отклонениям «в минус», и средняя невязка должна быть равна 0. Таким образом, средняя невязка позволяет оценить наличие в модели систематического отклонения расчетных величин от фактических;
- Стандартное отклонение невязок по уровням в метрах. В отличие от средней невязки характеризует величину, на которую расчетный уровень может отклоняться от фактического по отдельным замерам.

Для сравнения расчетных и фактических расходов на створах р. Хворостань использовались два критерия: взвешенная сумма квадратов невязок по расходам (составляющая целевой функции) и невязка в процентах от расхода.

При начальных значениях параметров величина целевой функции составила 10370, из которых 9098 – составляющая уровней и 1272 – составляющая расходов. Сопоставление модельных и фактических величин показано на соответствующих графиках на рисунках 5.5 и 5.6. После калибровки модели целевая функция снизилась до 811, из которых 569 – составляющая уровней и 242 – составляющая расходов.

В ходе калибровки были существенно снижены невязки как по уровням, так и по расходам. Стандартное отклонение невязок снизилось с 4.07 м до 1.67 м. Однако, в модели осталась систематическая ошибка. В среднем, расчетные уровни на модели на 0.55 м ниже фактических. Эта проблема требует отдельного рассмотрения. Следует еще раз обозначить, что в процессе автоматической калибровки для алгоритма, используемого программой PEST, единственным критерием «правильности» результатов моделирования является величина целевой функции. Рассмотрим, за счет чего решение, которое должно быть оптимальным, дает уровни, отличающиеся от фактических в среднем на 0.55 м.

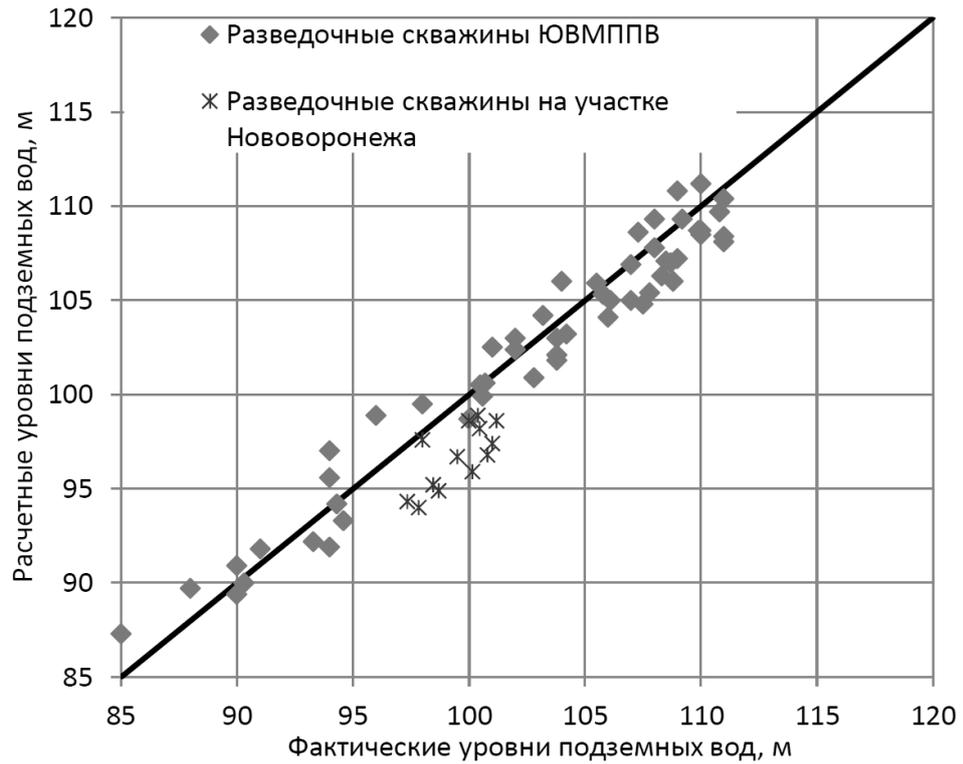


Рисунок 5.9. Сопоставление расчетных и фактических уровней.

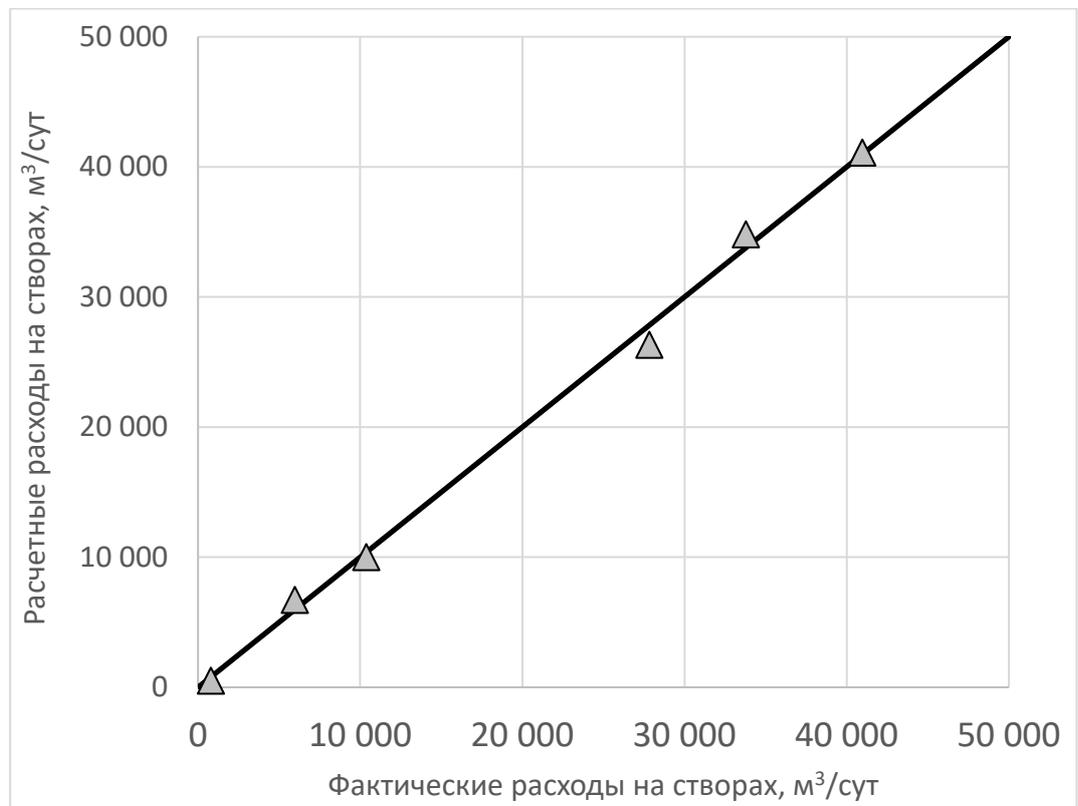


Рисунок 5.10. Сопоставление расчетных и фактических расходов р. Хворостань.

Замеры уровней объединены из двух групп – материалы разведки 1980 [161] и 2001 г. [149]. Рассматриваемая модель не учитывает временные изменения, и можно предположить, что разновременные замеры будут воспроизведены с различной ошибкой. На рисунке 5.9 замеры уровней обозначены разными символами. При этом видно, что замеры в скважинах на участке Нововоронежа выделяются в отдельную группу, для которой расчетные уровни строго ниже фактических. Отдельно по скважинам участка Нововоронежа средняя невязка составляет -2.57 м, средняя невязка по всем остальным скважинам составила -0.07 м. Таким образом, более ранние замеры уровней воспроизведены более точно. Это, скорее всего, связано с количеством замеров – при калибрации использовано 54 замера 1980 г и 13 замеров 2001 г. Следовательно, замеры уровней 2001 г имеют меньший вклад в общую целевую функцию. В подобных случаях (см. главу 4) замерам уровней, полученным из различных источников, могут быть назначены различные весовые коэффициенты. При необходимости можно разделить замеры уровней на группы и скорректировать весовые коэффициенты пропорционально количеству замеров в каждой группе согласно формуле (2.5). Для рассматриваемой модели такой необходимости нет. Замеры уровней на участке Нововоронежа представляются менее ценными для калибровки модели, поскольку характеризуют только сравнительно небольшой участок эксплуатируемого водоносного комплекса. Кроме того, водозаборы г. Нововоронежа расположены на удалении 20 км и более от перспективных водозаборов на Южно-Воронежском месторождении. Тогда как замеры уровней, произведенные при разведке в 1980 г распределены по всей территории месторождения.

Оценим «качество» выполненной калибровки по другим показателям. В дополнение к графику сопоставления фактических и расчетных уровней (рисунок 5.9), для наглядности, можно представить невязки в виде гистограммы частоты встречаемости отдельных значений невязок. На рисунке 5.11 приведено два варианта гистограмм – по всем 67 замерам и без замеров на участке Нововоронежа (54 замера). Гистограмма по форме не вполне соответствует нормальному распределению. Это обусловлено, в первую очередь, сравнительно небольшим количеством замеров. Гистограмма, построенная по специально сформированной выборке из тысячи значений (рисунок 2.6), также имеет видимые отклонения от нормального распределения. По этой причине более надежным является применение критерия Шапиро-Уилка W , описанного в разделе 2.6. Проверка по критерию W показывает, что невязки можно считать распределенными нормально – для двух вариантов величина критерия W больше критической для соответствующего размера выборки (см. рисунок 5.11).

Количественные критерии «качества» выполненной калибровки приведены в и перечислены выше. Кроме средней невязки и стандартного отклонения хорошим критерием является соотношение стандартного отклонения (1.67 м) к наблюдаемому максимальному

перепаду напоров (26 м). Это отношение составляет приблизительно 0.06, то есть стандартная ошибка моделирования составляет около 6% от подтвержденного измерениями перепада уровней подземных вод в пределах модели. В целом по модели максимальный перепад расчетных уровней составляет приблизительно 38 м. Отношение стандартной ошибки невязок к максимальному перепаду расчетных уровней составляет 0.044. С учетом принятых допущений и ограничений модель можно признать откалиброванной. При непосредственном участии автора данной работы после завершения калибровки с использованием описанной модели была выполнена переоценка запасов подземных вод на участке первого водозаборного узла. Соответствующий отчет [153] прошел защиту в ГКЗ, и по этому участку были утверждены запасы подземных вод в количестве 36 000 м³/сут.

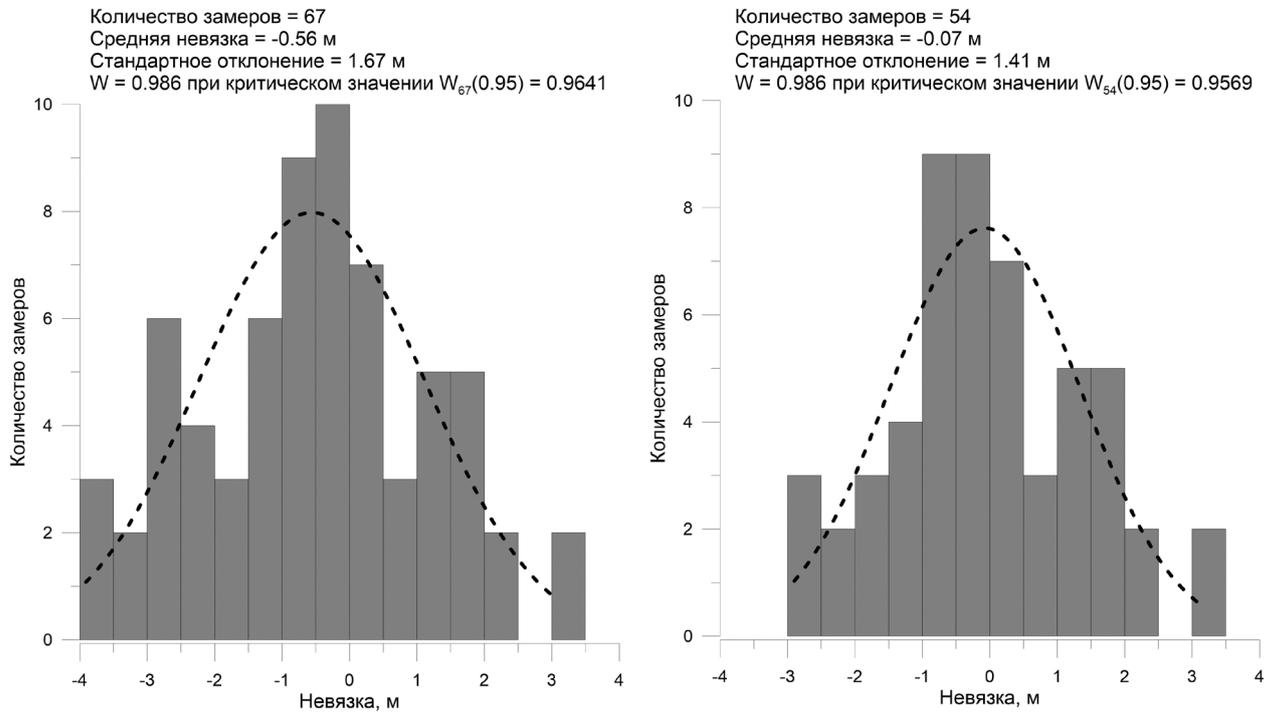


Рисунок 5.11. Гистограмма невязок между расчетными и фактическими уровнями.

5.1.5. Учет неоднородности донных отложений р. Хворостань

Рассматриваемая модель была откалибрована с учетом неоднородности донных отложений р. Хворостань. Итоговое распределение значений проводимости донных отложений представлено на Рисунок 5.12. Как указано выше, р. Хворостань представляет особый интерес, поскольку именно для нее ожидается максимальный относительный ущерб стоку, главным образом за счет работы перспективных водозаборных узлов 3 и 4.

На р. Хворостань в течение трех полевых сезонов проводились детальные гидрометрические исследования в комплексе с гидрохимическими опробованиями и русловыми геофизическими работами. В рамках уже выполненной работы возможно оценить вклад детальных исследований разгрузки подземных вод в процесс калибровки региональной геофильтрационной модели, а также оценить необходимость проведения таких детальных исследований. Более подробно эта задача рассмотрена в статье [33].

Для сравнения с уже полученными результатами была проведена калибровка модели по другой схеме. Предположим, что известен только расход на замыкающем створе р. Хворостань и не проводилось изучение донных отложений. В таком случае сопротивление донных отложений по всей длине русла полагается одинаковым. В остальном, набор калибруемых модельных параметров остается неизменным.

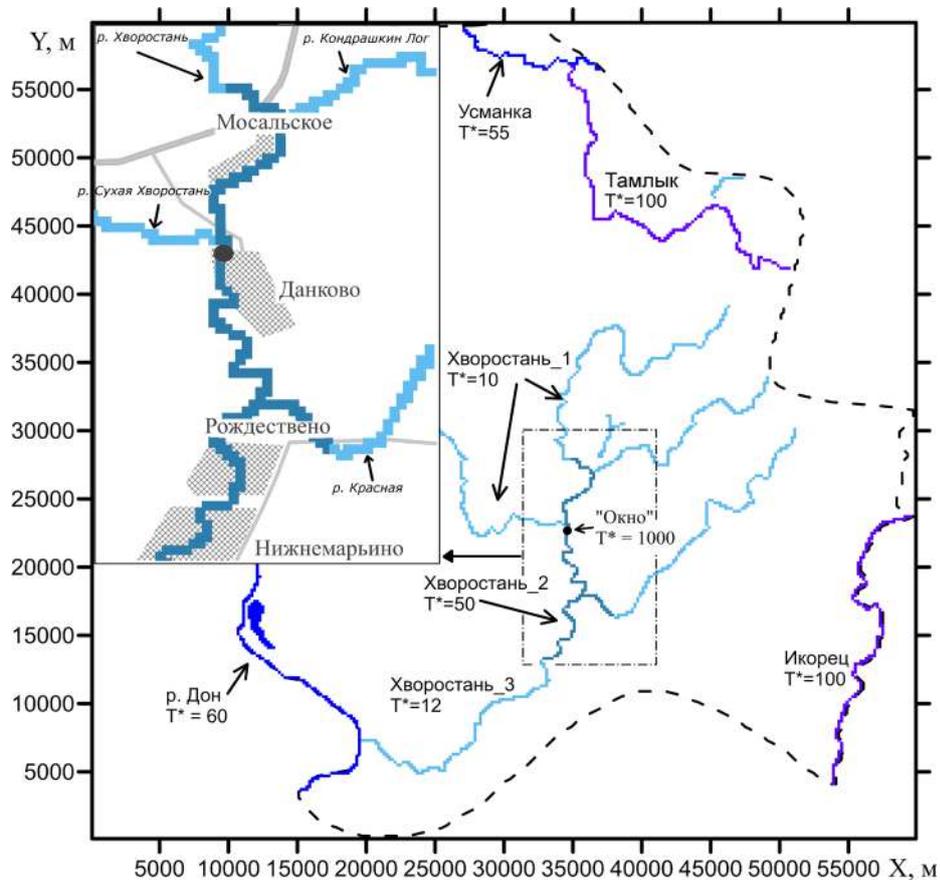


Рисунок 5.12. Распределение проводимости донных отложений ($m^2/сут$) после калибровки.

Поскольку во второй схеме калибрации используется один замер расхода вместо шести, весовой коэффициент для расхода увеличен в 6 раз и составил 1.5×10^{-3} . Это обеспечило сохранение пропорций составляющей целевой функции. С этими изменениями была заново выполнена калибрация модели. Откалиброванные величины инфильтрационного питания получились весьма близкими к результатам калибрации по первой схеме. Единое значение проводимости донных отложений р. Хворостань составило $31 \text{ м}^2/\text{сут}$, что близко к среднему арифметическому значению проводимости по выделенным трем зонам.

Расчетные уровни на моделях, откалиброванных в двух различных схемах, различаются незначительно. На рисунке 5.13 показано расхождение между двумя вариантами. Наибольшая разница наблюдается в непосредственной близости к руслу р. Хворостань, где практически нет наблюдательных скважин. При переходе к схеме без учета неоднородности в районе с. Данково проводимость донных отложений снизилась, на остальных участках – увеличилась. Следовательно, в районе с. Данково расчетные уровни подземных вод для схемы без неоднородности выше (до 1 м), в нижнем течении Хворостани – ниже (до 1.8 м). Для большинства используемых наблюдательных скважин разница между двумя схемами составляет менее 0.2 м. Можно считать, что учет или не учет неоднородности донных отложений не оказывает существенного влияния на величину расчетных уровней. Следовательно, при калибрации по существующим замерам уровней (без расходов) эта неоднородность не может быть выявлена.

Сравнение расходов приведено в таблице 5.4. Расчетные расходы р. Хворостань по створам значительно различаются, поскольку по схеме без учета неоднородности расходы по 5 створам из 6 не учитывались при калибрации. Для схемы без учета неоднородности существенно меньше расход р. Хворостань на створе №3, больше приращение расхода в нижнем течении. Расчетный расход на замыкающем створе воспроизводится с меньшей невязкой при калибрации по схеме без учета неоднородности. В этом варианте невязка составляет всего 0.07% по сравнению с невязкой в 4%, рассчитанной на основной модели.

Как указано выше, параметры донных отложений реки Хворостань представляют интерес для прогнозирования ущерба речному стоку. Для двух схем на модели произведена оценка влияния гипотетического водозабора. Водозабор задан на расстоянии 3 км к востоку от фильтрационного окна (Рисунок 5.13). Конструкция гипотетического водозабора основана на предполагаемой конструкции перспективного ВЗУ 3. На модели гипотетический водозабор задан в виде линейного ряда из 10 скважин длиной 1800 м с общим дебитом $40000 \text{ м}^3/\text{сут}$. Для оценки влияния этого водозабора он задан на откалиброванную модель, и произведен прогнозный расчет на 10000 суток. Дополнительно произведен расчет модели в стационарном режиме потока при действующем водозаборе.

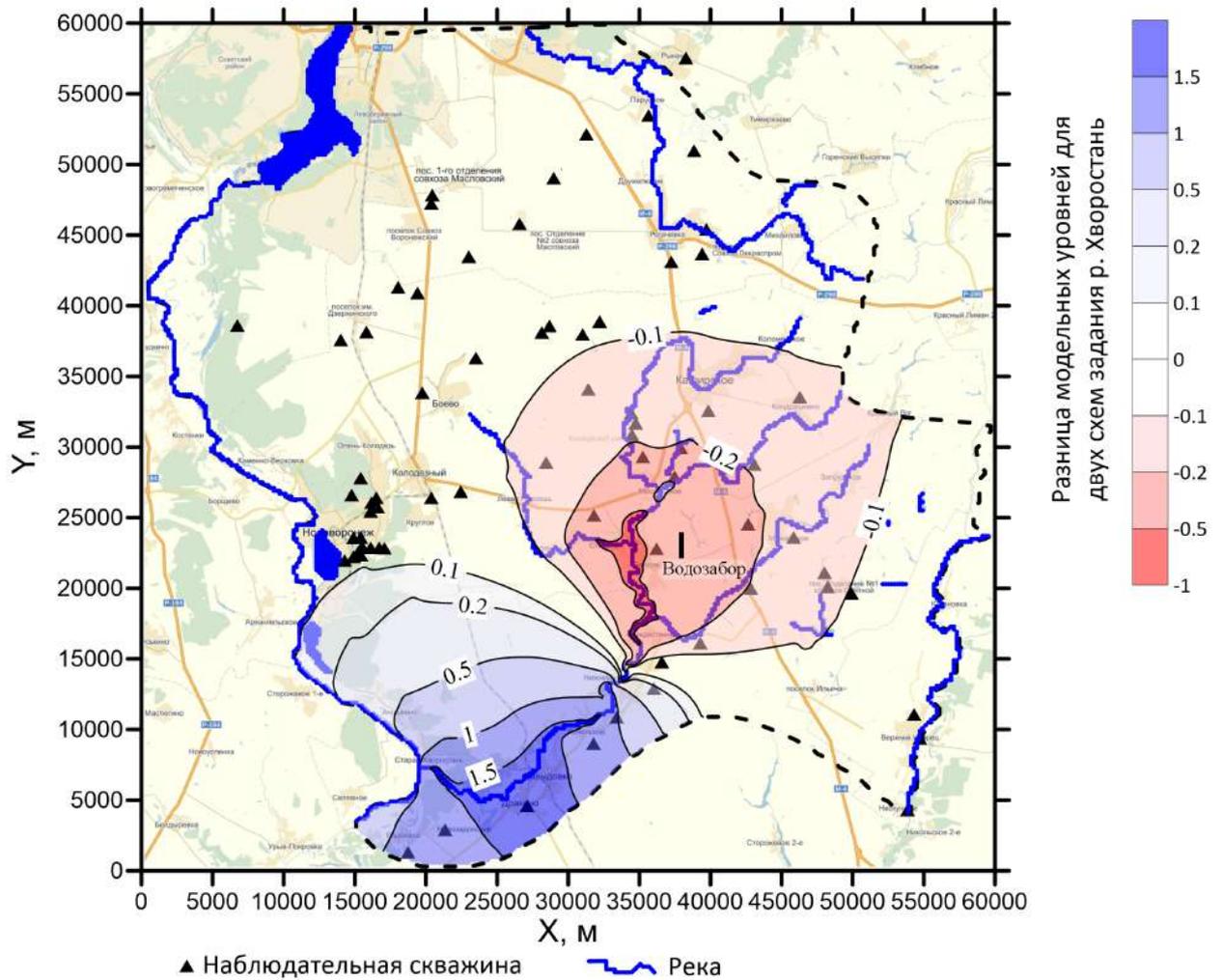


Рисунок 5.13. Разница модельных уровней подземных вод для схем с учетом и без учета неоднородности донных отложений.

Таблица 5.4. Сравнение модельных и замеренных расходов р. Хворостань.

Номер створа	Замеренный расход, м ³ /сут	Модельный расход, м ³ /сут. Схема с неоднородностью	Модельный расход, м ³ /сут. Схема без неоднородности
1	780	790	1170
2	5960	5080	3950
2а	10370	9530	6910
2б	-	12150	8880
3	27820	28250	19980
4	33780	33460	30330
5	40950	39330	40980

Как видно из графиков на рисунке 5.14, на конец прогнозного периода еще не устанавливается стационарный режим, и расход в р. Хворостань продолжает снижаться. Разница в расходе реки на конец прогнозного периода и в стационарном режиме довольно существенна. На конец прогнозного периода для схемы без неоднородности расход р. Хворостань на замыкающем створе составляет 25000 м³/сут. Для схемы с учетом неоднородности расход составляет 21000 м³/сут. Наиболее существенно различается расход на створе 2б, расположенном ниже фильтрационного окна. Для схемы с неоднородностью расход реки на створе №2б снижается с 12150 м³/сут до 2100 м³/сут. Для схемы без неоднородности расход снижается с 8880 м³/сут до 1330 м³/сут.

Учет в модели неоднородности донных отложений приводит к большему сокращению расхода реки на замыкающем створе. Прогнозируемое сокращение расхода р. Хворостань на замыкающем створе составляет приблизительно 16000 м³/сут без учета неоднородности и 20000 м³/сут при учете неоднородности, что на 25% больше.

Таким образом, использование метода совместной калибровки модели по замерам уровней и расходов позволило оценить изменение руслового сопротивления по длине реки. Учет этой неоднородности существенно влияет на прогнозируемое изменение речного стока.

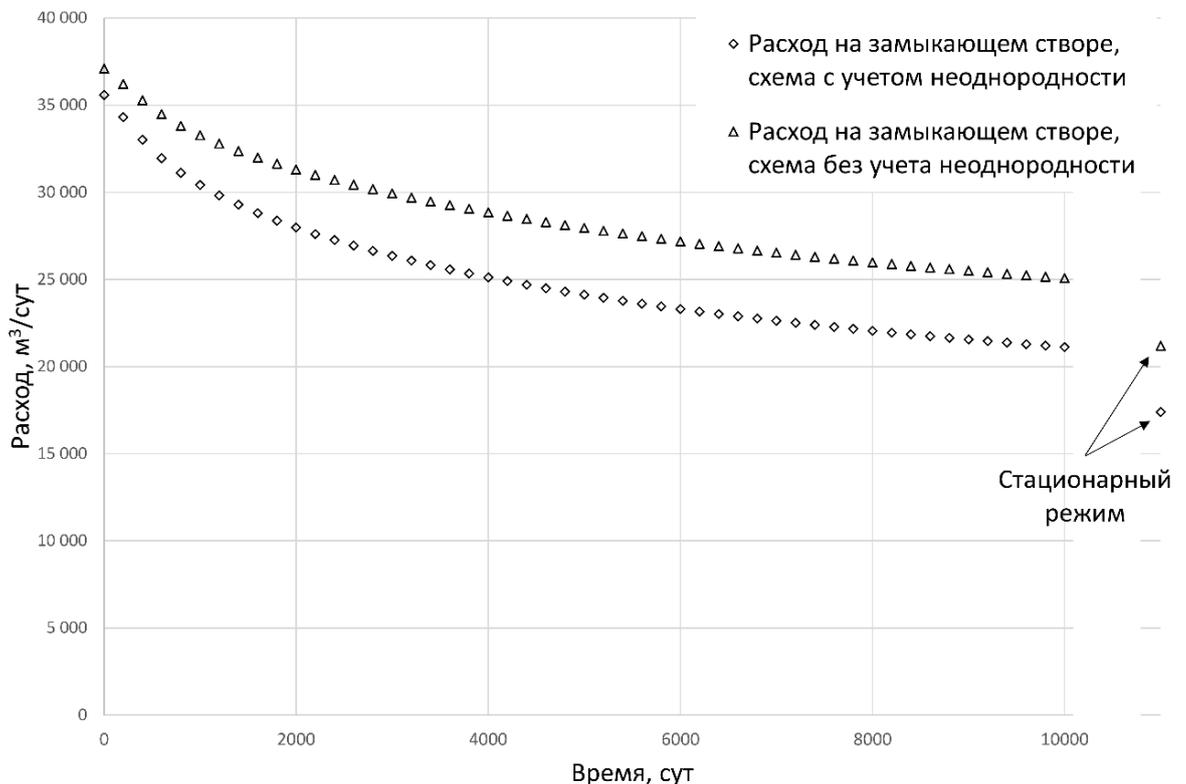


Рисунок 5.14. Модельное изменение расхода на замыкающем створе при работе водозаборного узла №3.

5.2. Бассейн р. Судогда

5.2.1. Описание объекта

Река Судогда расположена во Владимирской области. Судогодское месторождение подземных вод эксплуатируется с 1995 г. для водоснабжения г. Владимира. Это месторождение представляет интерес как пример речного бассейна, в котором необходимо дать прогноз эксплуатации водозабора подземных вод, оценить балансовые составляющие водоотбора и ущерб речному стоку. Указанные задачи решались, в том числе, с помощью математического моделирования.

Описание объекта приводится по следующим материалам:

- Первый отчет о детальной разведке подземных вод для водоснабжения г. Владимира по Судогодскому участку 1977 г. [159], материалы которого были использованы во всех дальнейших работах;
- Отчет о создании системы комплексного мониторинга в зоне влияния Судогодского водозабора, составленный в 2002 г. [156];
- Отчет о переоценке запасов подземных вод Судогодского водозабора, выполненной в 2014-2015 г. [160];
- Статьи, посвященные Судогодскому водозабору [14, 34, 92].

Судогда является правым притоком р. Клязьма. Общая площадь водосбора р. Судогда составляет 1900 км² при длине русла 116 км. Речная сеть хорошо развита. Основными притоками р. Судогда являются реки Ястреб, Побойка, Печенка, Яда, Войнинга и Сердуга (Рисунок 5.15). Поймы рек часто заболочены, болота занимают приблизительно 1% территории бассейна.

Судогодский водозабор расположен приблизительно в 9 км к югу от г. Судогда и в 40 км к юго-востоку от г. Владимир. Водозабор состоит из трех узлов, расположенных вдоль русла р. Судогды (Рисунок 5.16). Эксплуатируется гжельско-ассельский водоносный комплекс С₃g-Р₁a, представленный трещиноватыми известняками мощностью 30-50 м. В районе размещения водозаборов этот водоносный комплекс имеет высокую проводимость. Проводимость меняется от 250 до 5000 м²/сут [14], максимальные значения приурочены к долине р. Судогды. Гжельско-ассельский водоносный комплекс повсеместно, за исключением отдельных участков долины р. Судогды, перекрыт толщей глин татарского возраста Р₃, мощностью до 20 м. На пермских глинах залегают юрские глины келловей-киммериджского возраста J₂k-J₃km мощностью до 20 м.

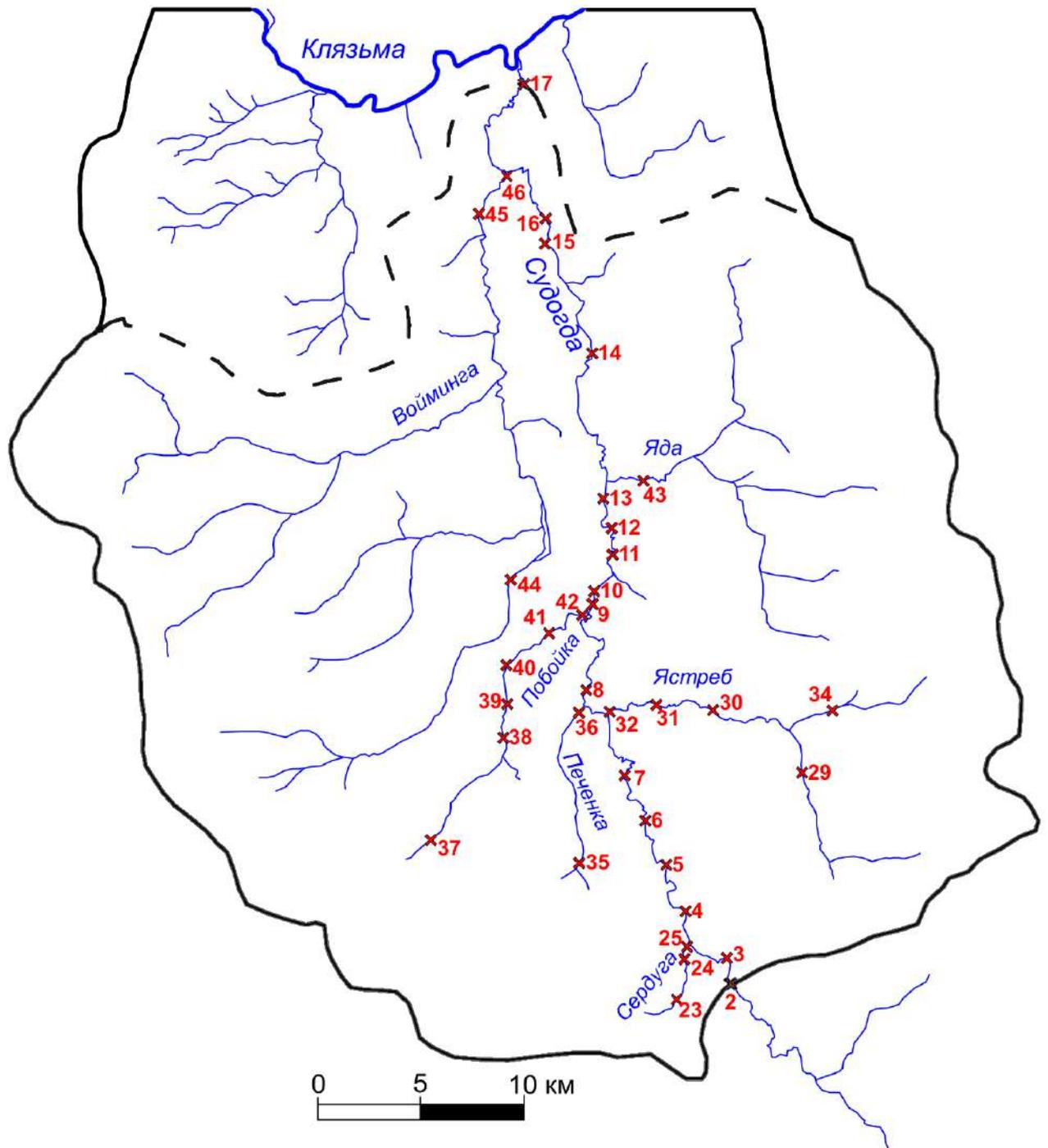


Рисунок 5.15. Граница расчетной области и расположение гидрометрических створов. Пунктирной линией показана граница расчетного бассейна р. Судогда (из отчета [160]).

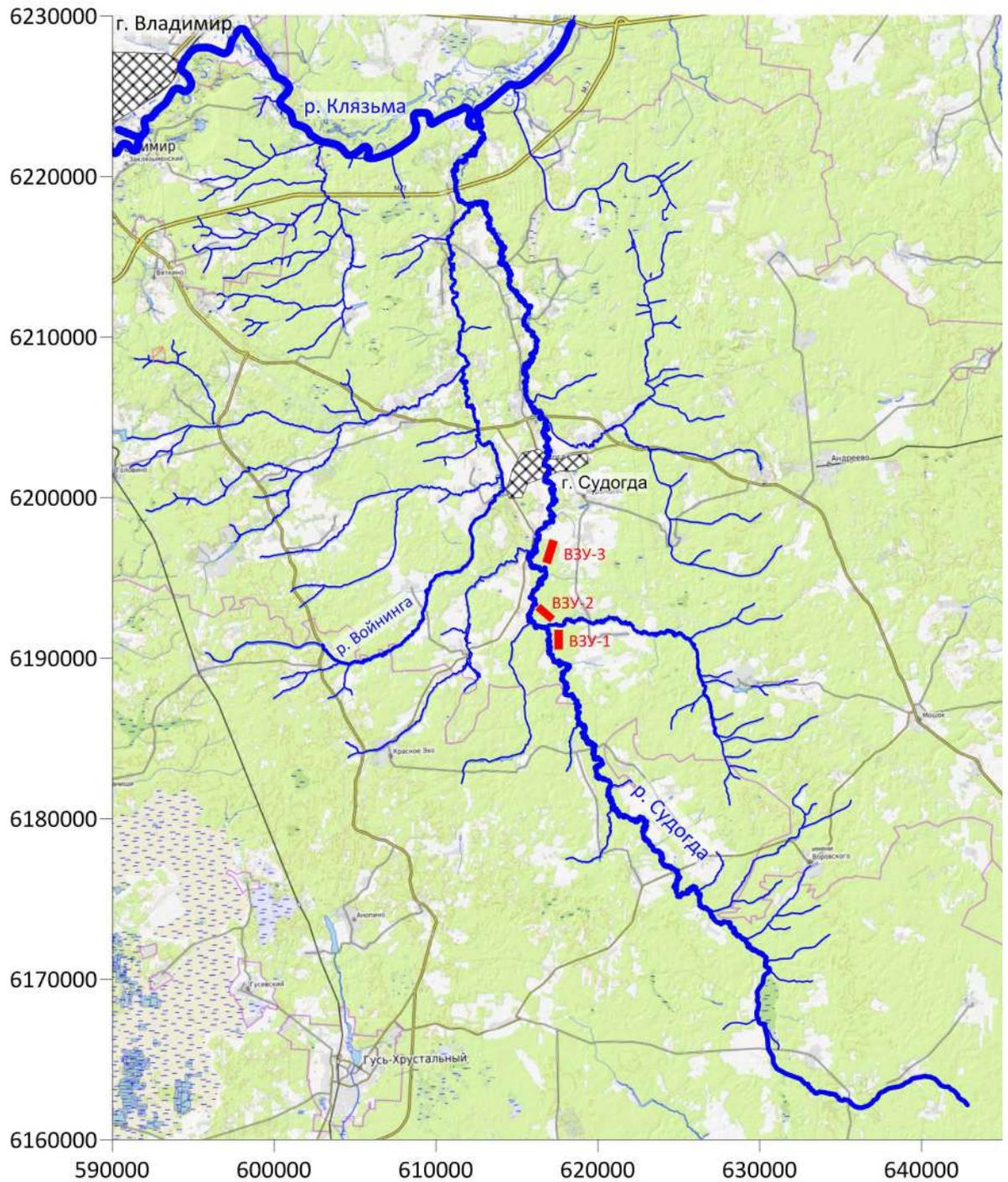


Рисунок 5.16. Схема расположения водозаборных узлов. Координаты в проекции UTM, зона 37N.

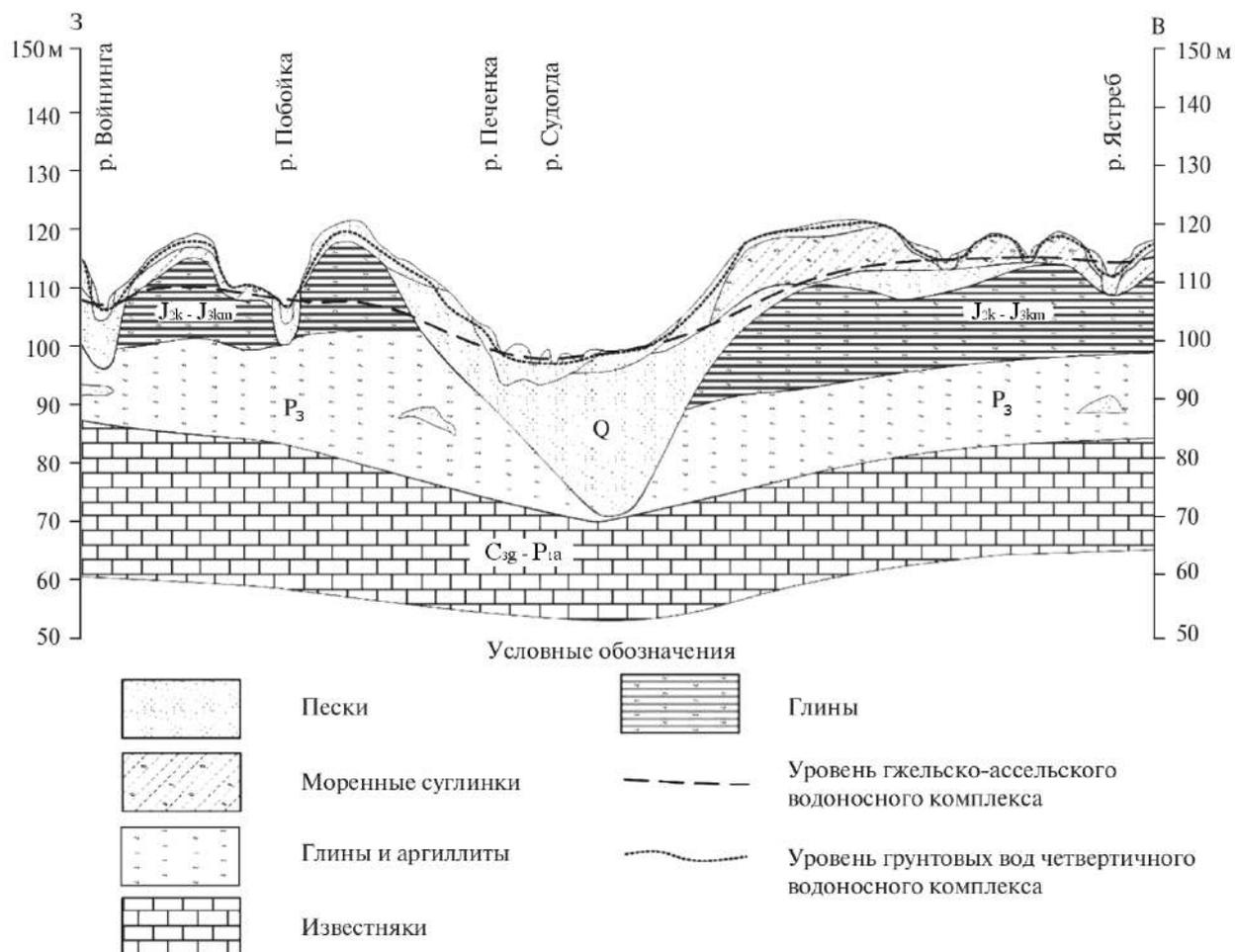


Рисунок 5.17. Разрез через долину р. Судогды (приводится по статье [14]).

Четвертичные отложения имеют преимущественно ледниковый, водно-ледниковый и аллювиальный генезис. Мощность четвертичных отложений изменяется от 0 до 30 м. В самой долине глины размывы, и аллювиальные отложения, представленные главным образом песками, залегают непосредственно на известняках. Именно на участках размыва формируется основная разгрузка гжельско-ассельского комплекса и в них расположены водозаборные узлы.

Производительность узлов следующая: ВЗУ-1 – 25 000 м³/сут; ВЗУ-2 – 22 000 м³/сут; ВЗУ-3 – 6 400 м³/сут. Анализ опыта эксплуатации водозабора и данных гидрогеологического мониторинга (см. рисунок 5.18) показал, что на месторождении сформировались многолетние стационарные балансово-гидрогеодинамические условия, при которых понижения уровней гжельско-ассельского водоносного комплекса и грунтовых вод практически не изменяются в многолетнем режиме, а внутригодовые вариации уровней в скважинах имеют естественный сезонный характер. Гидродинамические условия можно принять стационарными как до начала эксплуатации водозаборов, так и после 2000 года.

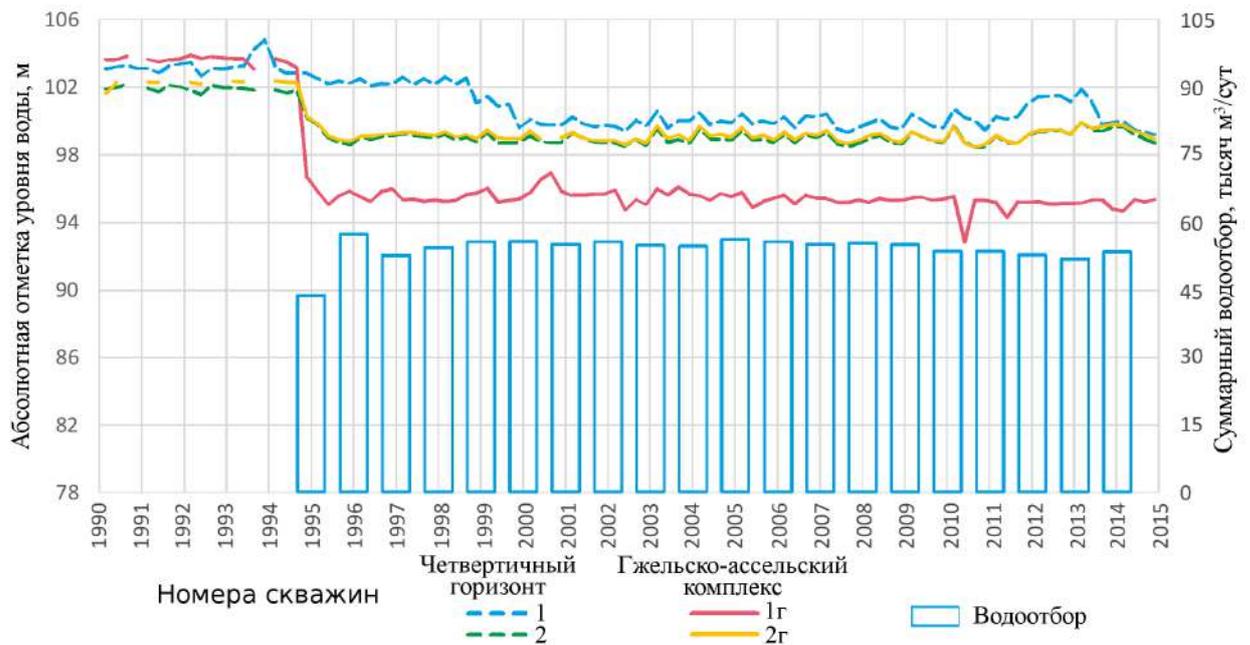


Рисунок 5.18. Изменение уровней подземных вод и суммарного водоотбора (приводится по статье [92]).

Сформировавшаяся область влияния Судогодского водозабора относительно невелика, локализуется в радиусе порядка 10 км, при этом максимальные понижения уровней подземных вод эксплуатируемого комплекса в районе водозаборных узлов не превышают 8 м. Снижение уровней гжельско-ассельского комплекса и его тесная гидравлическая связь с грунтовыми водами привели к формированию достаточно обширной депрессии УГВ с радиусом до 5 км и с максимальными понижениями до 2.2 – 3.2 м [34].

Еще до пуска водозабора, в 1989 г., была проведена экспертиза проекта, по рекомендациям которой Московской геолого-гидрогеологической партией ПГО «Центргеология» были выполнены дополнительные исследования, целью которых была оценка влияния водоотбора на компоненты природной среды. Позднее был выполнен анализ опыта эксплуатации водозабора в 1997 и 2002 г. [160].

Таким образом, была произведена подробная гидрометрическая съемка по р. Судогда и ее притокам в межень 1989, 2002 и 2014 гг. Схема расположения гидрометрических створов приведена на рисунке 5.15. Детальное изучение речного стока до и после начала эксплуатации водозабора позволило с высокой степенью достоверности оценить балансовые составляющие водоотбора и, в частности, ущерб речному стоку. Величины суммарного сокращения стока р. Судогды по данным 2002 и 2014 г. оказались практически одинаковы, что подтверждает стабилизацию влияния водозабора на гидрогеодинамическую обстановку территории [14].

Проведение подробной гидрометрической съемки до и после начала эксплуатации водозабора позволило оценить балансовые составляющие водоотбора. Анализ опыта эксплуатации водозабора показал, что сокращение речного стока меньше дебита эксплуатации. Сокращение меженного расхода составляет в среднем 37 000 м³/сут при среднем дебите водозабора 53 400 м³/сут [14]. Это свидетельствует о существовании других источников формирования эксплуатационных запасов. Вероятнее всего, часть водоотбора формируется за счет увеличения инфильтрационного питания и сокращения эвапотранспирационной разгрузки. Эта составляющая баланса обеспечивает приблизительно 30% всего водоотбора (~16 400 м³/сут). Изменение баланса зоны аэрации связано, главным образом, со снижением уровня грунтовых вод. С целью уточнения условий формирования эксплуатационных запасов Судогодского месторождения подземных вод было выполнено эпигнозное моделирование.

5.2.2. Описание модели

Для расчета балансовых составляющих водоотбора используется геогидрологическая модель, состоящая из трех взаимосвязанных блоков: формирование питания, геофильтрационный поток и взаимодействие подземных и речных вод. Автор данной работы выполнял моделирование геофильтрационного потока и взаимодействия подземных вод с реками используя программу Modflow версии 2005 [96].

Моделирование инфильтрационного питания и эвапотранспирационной разгрузки описано в отчете [160] и статьях [14, 34, 92] и было выполнено, главным образом, Гриневским С.О. Расчет результирующего питания подземных вод выполнялся с помощью двух модулей. В первую очередь моделируется трансформация атмосферной влаги на поверхности земли и выполняется расчет водного баланса в одномерной вертикальной колонке, верхняя условная граница которой соответствует кровле растительного покрова, а нижняя – поверхности почвы. В этом расчетном модуле вычисляется расход поступления влаги в зону аэрации, формирующийся с учетом неравномерности поступления осадков, процессов их задержания и испарения растительностью, условий снегонакопления и снеготаяния, промерзания и оттаивания почвы, а также стокообразования. Численная реализация моделей этих процессов осуществлена в программном коде SurfBal [12]. Результаты моделирования водного баланса на поверхности земли определяют условие на верхней границе второго расчетного модуля, представленного моделью одномерного вертикального влагопереноса от поверхности почвы до УГВ с учетом испарения из почвы и транспирационного отбора влаги корнями растений, реализованной в широко известном программном коде HYDRUS-1D [131]. При этом величина инфильтрационного питания или эвапотранспирационной разгрузки оценивается как

нисходящий или восходящий расход влаги через нижнюю границу модели влагопереноса, где задается напор, равный высоте положения УГВ.

Использование указанных одномерных моделей осуществляется на основе районирования по комплексу метеорологических, ландшафтных и гидрогеологических факторов. Было выделено семь ландшафтных зон, для которых были рассчитаны характерные параметры инфильтрационного питания и эвапотранспирационной разгрузки. Подробно выделение этих ландшафтных зон описано в отчете [160].

В данной работе используются уже обоснованные параметры питания и далее описывается разработка геофильтрационной модели для Modflow. Бассейн р. Судогды моделируется не полностью. В расчетную область включена часть водосборного бассейна, ограниченная створом №2 (Рисунок 5.15) общей площадью 1490 км².

Моделируется два характерных состояния подземных вод: естественные и нарушенные условия. Название «естественные условия» подразумевает условия, известные до начала эксплуатации Судогдского водозабора. Как указано выше, режим потока можно принять стационарным и для естественного, и для нарушенного состояния. Эти состояния могут быть воспроизведены в одной модели. Для этого задается два стационарных стресс-периода. Периоды различаются наличием или отсутствием водозаборных скважин, а также величинами результирующего питания. Все остальные модельные параметры не изменяются во времени. Параметры граничных условий соответствуют 30-суточному меженному периоду 50% обеспеченности.

В плане использована равномерная сеточная разбивка. Размер каждого модельного блока составил 250 × 250 м, общий размер модельной сетки 50 × 56 км.

Структура. Разрез схематизирован двумя модельными слоями. Первый модельный слой соответствует четвертичным отложениям. Второй модельный слой соответствует гжельско-ассельскому комплексу. Разделяющий слой не выделен в самостоятельный модельный слой и учитывается в параметре перетока. Снизу разрез ограничен регионально выдержанной толщиной щелковских глин верхнего карбона. Мощность первого модельного слоя задана согласно геологическому разрезу. Второй модельный слой соответствует трещиноватым известнякам. Для расчетов используется параметр проводимости водоносного комплекса, и воспроизведение мощности этого комплекса в модели не требуется. По этой причине его мощность для всей модели принята одинаковой и составляет 20 м.

Границы. Внешние плановые границы модели показаны на рисунке 5.15. В целом граница модели совпадает с границей водосборного бассейна р. Судогды. Согласно отчету 2002 г. [156] подземный сток реки Судогды практически обеспечивается инфильтрационным питанием в пределах её бассейна. Соответственно, западная, южная и восточная границы

модели заданы непроницаемыми. На севере модель ограничена р. Клязьма, которая является региональной дренажной. На модели она задана как граница с постоянным напором. Абсолютные отметки реки сняты с топографических карт.

На верхней границе модели задано два граничных условия. Моделируется поступление воды с инфильтрационным питанием с постоянным расходом. По типу почв и растительности выделено семь ландшафтных зон с различными значениями питания. Подробно методика выделения зон и расчета величины инфильтрационного питания приведена в отчете 2015 года [160]. Вторым условием на верхней границе модели является эвапотранспирационная разгрузка. Эвапотранспирационная разгрузка моделируется переменной, с линейной зависимостью величины эвапотранспирации от глубины залегания уровня грунтовых вод (модуль Evapotranspiration [96]):

$$ET = \begin{cases} ET_{max} & \text{при } z \leq 0 \\ 0 & \text{при } z \geq z_{crit} \\ ET_{max} * \frac{z_{crit}-z}{z_{crit}} & \end{cases} \quad (5.1)$$

где ET – величина эвапотранспирации; ET_{max} – потенциальная (максимальная) эвапотранспирация; z – глубина УГВ; z_{crit} – критическая глубина, на которой эвапотранспирационная разгрузка прекращается. Такое сочетание постоянной величины инфильтрационного питания и переменной величины эвапотранспирационной разгрузки позволяет смоделировать переменное результирующее питание во всем требуемом диапазоне значений. Для каждой из семи выделенных ландшафтных зон заданы собственные параметры эвапотранспирации.

Внутренними граничными условиями являются реки и водозаборные скважины. Водозаборные скважины моделируются границей с постоянным расходом, который задается равным среднему эксплуатационному дебиту для каждой скважины.

Реки задаются граничным условием третьего рода с возможностью отрыва. Для того, чтобы учесть сокращение речного стока при работе водозабора, требуется усложненная модель водотоков. Используется модуль Stream (STR) [96], который основан на уравнении Шези, которая однозначно связывает расход водотока P с его глубиной h_p при постоянстве его ширины b и уклона I :

$$P = Cbh_p\sqrt{h_pI}, \quad (5.2)$$

в котором C – коэффициент Шези, характеризующий гидравлическое сопротивление русла:

$$C = \frac{1}{n}h_p^{1/6}, \quad (5.3)$$

где n – коэффициент Маннинга (коэффициент шероховатости русла). Применение модуля Stream подробно описано в соответствующем руководстве [121], дополняющем общее руководство по Modflow [96]. Абсолютные отметки уровня воды в водотоках заданы в соответствии с топографическими картами. Гидрологические характеристики получены по результатам гидрометрических работ 1989–2014 гг. и обобщены в отчете [160].

Параметры. В качестве геофильтрационных параметров используются коэффициенты фильтрации (для первого слоя) и проводимость (для второго слоя). Взаимодействие двух водоносных горизонтов через слабопроницаемые отложения характеризуется соответствующей величиной параметра перетекания. Неоднородность всех параметров задана методом зонирования.

Зоны неоднородности коэффициентов фильтрации первого слоя заданы в соответствии с картой четвертичных отложений. Диапазон изменения коэффициентов фильтрации первого слоя составляет от 0.1 – 20 м/сут. Всего выделено 8 зон.

Проводимость гжельско-ассельского комплекса основана на материалах детальной разведки 1977 г., и картограмма проводимости была актуализирована в 2014 г. [160]. Диапазон изменения проводимости составляет 200 – 5000 м²/сут. Всего было выделено 9 зон.

Параметр перетекания задан в соответствии с мощностью глин. Диапазон изменения составляет 10^{-5} – 10^{-2} сут⁻¹. В долине р. Судогды в зависимости от условий дренирования коэффициент перетекания увеличивается на отдельных участках (в литологических окнах) до 1 сут⁻¹. Всего было выделено 15 зон. В общей сложности в модели выделено 32 параметра.

Поскольку моделируется стационарный поток, емкостные параметры не используются.

5.2.3. Калибрация модели

Наблюдения, используемые для калибровки описанной модели получены при обобщении следующих материалов:

- 20-летнего опыта эксплуатации Судогодского водозабора;
- 20-летних рядов наблюдений за уровнями подземных вод;
- Трех гидрометрических съемок на площади бассейна р. Судогды (1989, 2002 и 2014 гг.);
- Рядов наблюдений за расходом реки на стационарном гидрологическом посту.

Обобщение было выполнено коллективом авторов, занимавшихся переоценкой запасов для Судогодского водозабора и принимавших участие в написании соответствующего отчета [160], в первую очередь Гриневским С.О. Поскольку моделируется стационарный режим, все известные наблюдения уровней были усреднены. Расходы по всем створам приведены к меженным расходам 50% обеспеченности. Таким образом, используемые при калибровке «наблюдения» не являются прямыми замерами расходов или уровней. На каждый из двух

стресс-периодов сформировано 16 значений уровней подземных вод и 13 значений расходов, рассчитанных в одних и тех же точках. Таким образом, имеется два набора наблюдений – уровни подземных вод и расходы рек, для естественного и нарушенного состояния, всего 58 значений. При калибрации они использовались совместно в единой целевой функции.

Используемые наблюдения являются результатом осреднения и/или пересчета ряда замеров, и при расчете весовых коэффициентов необходимо учесть все составляющие дисперсии. Для уровней дисперсия, обусловленная ошибкой измерения σ_u намного меньше дисперсии, обусловленной многолетними колебаниями ($\sigma_{мл}$). Такая же особенность описана для Южно-Воронежского месторождения в разделе 5.1.3. Уровни подземных вод, принимаемые в качестве стационарных, рассчитываются как среднее арифметическое за некоторый период. Для естественных условий период осреднения – с 1990 по 1994 г., для нарушенных – с 2000 по 2014 г. В период с 1995 по 1999 г. наблюдения по некоторым скважинам (например, скв №1 на рисунке 5.18) не позволяют считать режим потока стационарным. Для расчета весовых коэффициентов используется дисперсия, рассчитанная по всем замерам за период осреднения.

В таблице 5.5 приведены значения дисперсии и весовые коэффициенты для используемых наблюдений. Скважины с индексом «г» оборудованы на гжельско-ассельский комплекс, остальные скважины оборудованы на четвертичный горизонт. Распишем для примера расчет весового коэффициента для скважины №1г в естественных условиях. Общее количество замеров $M_o = 58$, количество замеров уровней $M_H = 32$. На данном этапе определения весов нет оснований разделять поправочные коэффициенты α для двух групп наблюдений и они равны между собой: $\alpha = 0.5$ д.е. Дисперсия $\sigma_{H-1г}^2$ замеров в скважине №1г за период 1990 – 1994 г. равна 0.04 м^2 . Таким образом, весовой коэффициент, согласно формуле (2.5), равен
$$\omega_H^{1г} = \alpha_H \frac{M_o}{M_H \sigma_{H-1г}^2} = 0.5 \frac{58}{32 \times 0.04} = 22.7 \text{ м}^{-2}.$$

Для значений расходов рек в отчете [160] не выполнена оценка погрешности как для измерений, так и для расчетных значений межennaleго расхода 50% обеспеченности. В качестве погрешности, аналогично описанному в разделе 5.1.3, примем рекомендуемую в учебнике «Гидрометрия» [23] величину в 6%. Соответственно, значение весового коэффициента для каждого наблюдения будет зависеть от принятого значения расхода реки на створе. Названия рек и расположение створов показано ниже, на рисунке 5.19. В таблице 5.6 приведены весовые коэффициенты для расходов. Следует отметить, что выбранная оценка погрешности измерений является ненадежной, и может потребоваться корректировка весовых коэффициентов расходов за счет изменения поправочного коэффициента α_Q .

Таблица 5.5. К расчету весовых коэффициентов для уровней.

Номер скважины	Естественное состояние		Период эксплуатации водозабора	
	Дисперсия, м ²	Весовой коэффициент, м ⁻²	Дисперсия, м ²	Весовой коэффициент, м ⁻²
1Г	0.04	22.7	0.75	1.2
2Г	0.04	22.7	0.16	5.7
3Г	0.02	45.3	0.14	6.5
5Г	0.05	18.1	0.34	2.7
7Г	0.00	90.6	0.25	3.6
8Г	0.01	90.6	0.46	2.0
10Г	0.01	90.6	0.12	7.6
1	0.31	2.9	0.39	2.3
2	0.05	18.1	0.16	5.7
3	0.10	9.1	0.12	7.6
4	0.09	10.1	0.13	7.0
6	0.14	6.5	0.31	2.9
7	0.20	4.5	0.26	3.5
7а	0.18	5.0	0.20	4.5
8	0.13	7.0	0.26	3.5
10	0.15	6.0	0.31	2.9

Таблица 5.6. К расчету весовых коэффициентов для расходов.

Река, № створа	Естественное состояние			Период эксплуатации водозабора		
	Расчетное приращение расхода, м ³ /сут	Дисперсия м ⁶ /сут ²	Весовой коэффициент сут ² /м ⁶	Расчетное приращение расхода, м ³ /сут	Дисперсия м ⁶ /сут ²	Весовой коэффициент сут ² /м ⁶
Сердуга	32 832	1970	5.66×10 ⁻⁴	32832	1970	5.66×10 ⁻⁴
Печенка	1 037	62	1.79×10 ⁻²	1037	62	1.79×10 ⁻²
Ястреб	4 320	259	4.30×10 ⁻³	4320	259	4.30×10 ⁻³
Побойка	3 802	228	4.89×10 ⁻³	3802	228	4.89×10 ⁻³
Яда	3 974	238	4.68×10 ⁻³	3874	232	4.80×10 ⁻³
Войминга	12 960	778	1.43×10 ⁻³	12960	778	1.43×10 ⁻³
Судогда №5	34 560	2074	5.38×10 ⁻⁴	34560	2074	5.38×10 ⁻⁴
Судогда №7	50 112	3007	3.71×10 ⁻⁴	50112	3007	3.71×10 ⁻⁴
Судогда №8	33 523	2011	5.55×10 ⁻⁴	3197	192	5.81×10 ⁻³
Судогда №10	19 008	1140	9.78×10 ⁻⁴	17712	1063	1.05×10 ⁻³
Судогда №13	57 888	3473	3.21×10 ⁻⁴	53136	3188	3.50×10 ⁻⁴
Судогда №15	10 714	643	1.74×10 ⁻³	10714	643	1.74×10 ⁻³
Судогда №17	20 736	1244	8.96×10 ⁻⁴	20736	1244	8.96×10 ⁻⁴

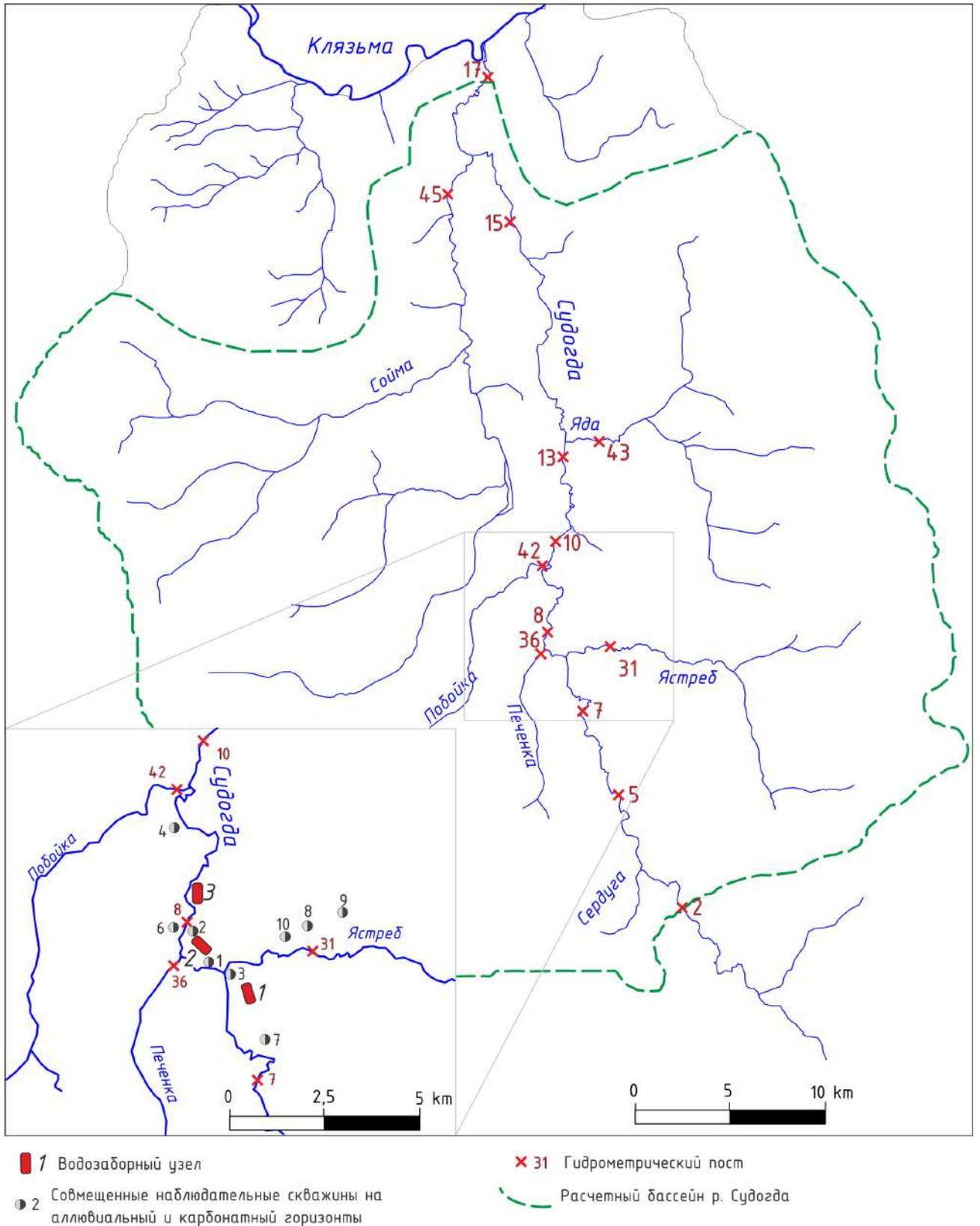


Рисунок 5.19. Схема расположения наблюдательных скважин и использованных гидрометрических постов.

При начальных значениях параметров результаты моделирования следующие. Средняя невязка по уровням составляет -1.25 м, стандартное отклонение 3.14 м. Невязки приращения расходов по отдельным створам достигают 70%, расчетный расход на замыкающем створе на 6% меньше фактического. Рассмотрим подробнее водный баланс модели при начальных значениях параметров. В таблице 5.7 приведен модельный баланс для естественных и нарушенных условий. Отбор подземных вод скважинами составляет 53.4 тыс. м³/сут. Водоотбор компенсируется уменьшением эвапотранспирации на 7.3 тыс. м³/сут, увеличением фильтрационных потерь из рек на 6.3 тыс. м³/сут и уменьшением разгрузки в реки на 39.8 тыс. м³/сут.

Как упомянуто выше, сокращение эвапотранспирационной разгрузки должно составлять приблизительно 16.4 тыс. м³/сут [14]. Следовательно, невязка эвапотранспирационной разгрузки составляет приблизительно 9 тыс. м³/сут, и невязка расхода р. Судогды на замыкающем створе, вероятнее всего, связана именно с недостаточно точным воспроизведением на модели эвапотранспирационной разгрузки. Следовательно, выполненную оценку величины инфильтрационного питания можно признать верной.

Увеличение расчетной эвапотранспирации при сохранении прочих составляющих водного баланса приведет к соответствующему увеличению речного стока. Расчетная разгрузка зависит как от специфических параметров (потенциальная эвапотранспирация и критическая глубина), так и от расчетных уровней грунтовых вод. Которые, в свою очередь, зависят от фильтрационных параметров и величины инфильтрационного питания. Из этих групп параметров геофильтрационные известны наименее точно, и именно их значения уточняются при решении обратной задачи.

Таблица 5.7. Баланс модели в естественных условиях.

Статья баланса	Приход, тыс. м ³ /сут	Расход, тыс. м ³ /сут	Разница, тыс. м ³ /сут
Естественные условия			
Разгрузка в (из) Клязьму	0.6	34.0	-33.4
Поступление осадков	560.1	–	560.1
Разгрузка испарением	–	241.9	-241.9
Разгрузка в (из) реки	0.1	284.3	-284.2
Всего	562.9	562.3	0.6
Дисбаланс		0.1%	
Нарушенные условия			
Разгрузка в (из) Клязьму	0.6	33.8	-33.4
Поступление осадков	560.1	–	560.1
Разгрузка испарением	–	234.6	-234.6
Разгрузка в (из) реки	6.4	244.5	-238.1
Отбор воды скважинами	–	53.4	-53.4
Всего	567.1	566.3	0.8
Дисбаланс		0.1%	

Кроме того, при начальных значениях параметров было рассчитано значение целевой функции. При весовых коэффициентах, приведенных выше в таблицах 5.5 и 5.6, целевая функция S оказалась равной 1.97×10^6 д.е., при этом сумма взвешенных невязок по уровням составила только 2×10^4 д.е. или только 1% от всей целевой функции. Очевидно, не выполняется условие равенства вклада разных составляющих в целевую функцию. При текущих значениях весовых коэффициентов уровни будут фактически исключены из процесса калибровки. По этой причине значения весовых коэффициентов для расходов были скорректированы, а именно – снижены на два порядка, и новое значение поправочного коэффициента α_Q составило 0.005 д.е. (вместо исходного значения 0.5). Новое значение целевой функции S составило 3.95×10^4 д.е. Соблюдение равенства долей разных наблюдений позволит более корректно выполнить анализ чувствительности при начальных значениях параметров, однако, впоследствии может потребоваться новое изменение поправочного коэффициента в расчете весовых коэффициентов.

После корректировки весов была оценена чувствительность модели к изменению параметров. Для всех 32 геофильтрационных параметров была вычислена чувствительность в трех вариантах: с использованием только расходов; только уровней; всех наблюдений. Результаты представлены на рисунке 5.20. Для сравнения вариантов приведены абсолютные значения чувствительности в логарифмическом масштабе. У большинства параметров чувствительность, рассчитанная только по замерам уровней на два-три порядка ниже, чем чувствительность, рассчитанная по всем замерам.

Несколько более низкая чувствительность при использовании всех замеров по сравнению с использованием только расходов обусловлена принципом расчета чувствительности css (см. раздел 2.2). Обобщенная чувствительность вычисляется как средневзвешенная чувствительность каждого отдельного наблюдения к изменению рассматриваемого параметра. При добавлении к осреднению замеров с меньшей чувствительностью средняя величина, очевидным образом, снижается.

Для выбора параметров использована чувствительность, рассчитанная с использованием всех замеров. В качестве предельного значения выбрана чувствительность, равная 1% от максимальной. Параметры, имеющие меньшую чувствительность, были исключены из калибровки. На подбор оставлено 17 параметров из 32: 3 горизонтальных K_f первого слоя; 8 параметров проводимости; 6 параметров перетекания.

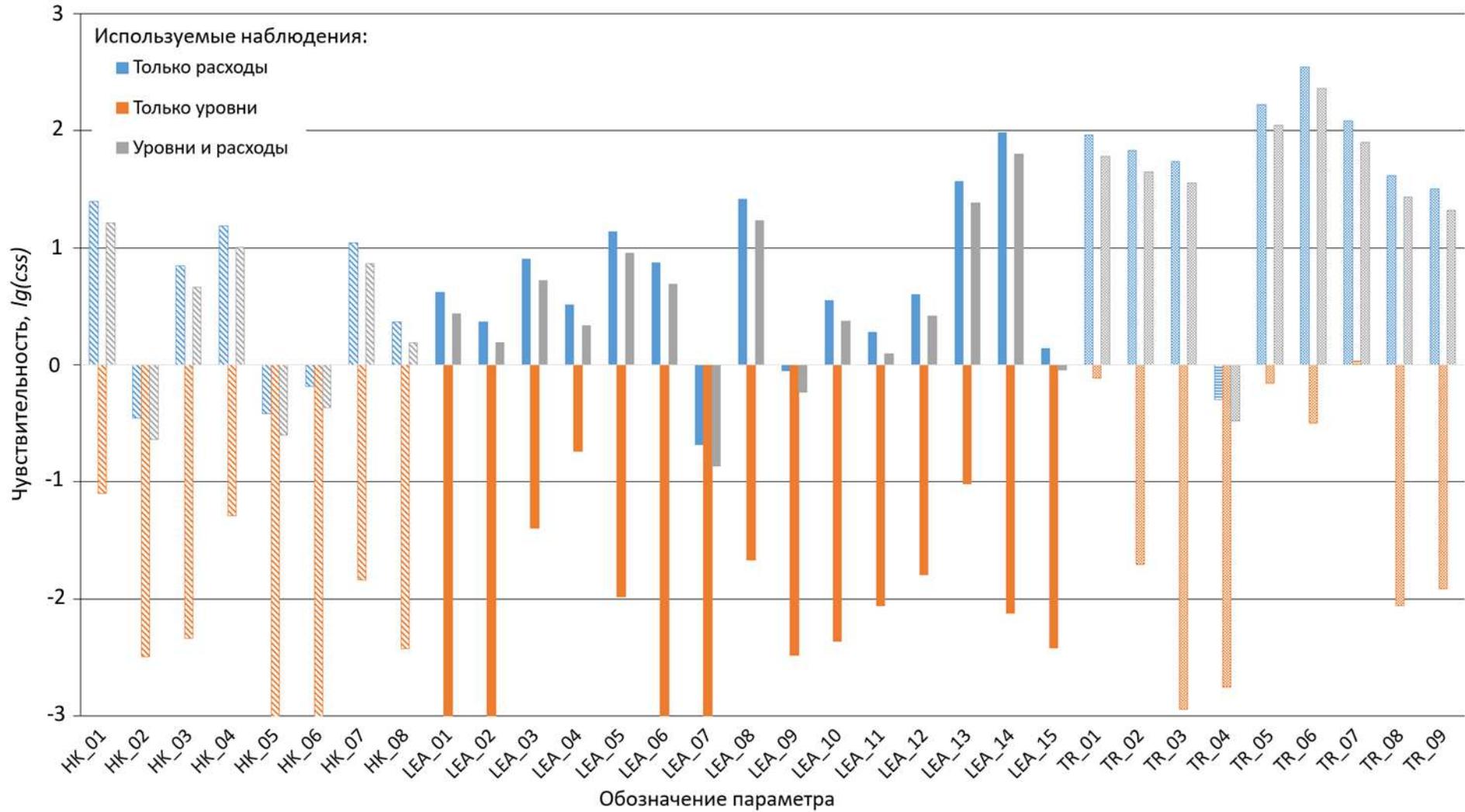


Рисунок 5.20. Сравнение чувствительности различных параметров модели. Разные группы параметров показаны разной штриховкой.

После оценки чувствительности и выбора параметров была выполнена первая итерация калибровки. Результаты приведены на рисунках 5.21 и 5.22. Средняя невязка по уровням составила 0.1 м, стандартное отклонение 2.0 м. Невязки расходов по отдельным створам достигают 30%, однако модельный расход на замыкающем створе всего на 4% меньше фактического. Общее значение целевой функции S равно 3020 д.е., при этом сумма невязок по уровням составляет 1056 д.е. или 35% от целевой функции. При таком соотношении вклад двух разных групп наблюдений имеет один порядок и дальнейшая корректировка весовых коэффициентов не требуется. Откалиброванная таким образом модель была использована для оценки влияния многолетнего изменения климата на баланс водоотбора. Результаты были опубликованы в 2018 г. в соответствующей статье [92].

Однако, на откалиброванной модели не удастся правильно воспроизвести баланс водоотбора. Сокращение эвапотранспирационной разгрузки составляет только $\sim 9\,000$ м³/сут или 17% от дебита водозабора. Это не вполне соответствует результатам гидрометрической съемки. В то же время, при калибровке был достигнут минимум целевой функции. Без каких-либо существенных изменений представляется невозможным методами автоматической калибровки найти такое сочетание модельных параметров, чтобы воспроизвести на модели известный баланс водоотбора.

При необходимости добиться точного воспроизведения на модели балансовых составляющих водоотбора можно дополнить набор наблюдений. К замерам уровней и расходов в явном виде добавлена требуемая величина сокращения эвапотранспирации в $16\,400$ м³/сут как априорная информация. Для априорной информации невозможно заранее оценить оптимальную величину весового коэффициента. Для его приблизительного расчета можно использовать желаемую величину невязки баланса. Приняв величину желаемой невязки баланса в 1% от общей величины водоотбора или 534 м³/сут, можно рассчитать весовой коэффициент априорной информации ω_{PR} по формуле (2.5). Учитывая, что априорное значение только одно, получаем
$$\omega_{PR} = \alpha_{PR} \frac{M_O}{M_{PR} \sigma_{PR}^2} = 0.5 \frac{59}{1 \times 534^2} = 1 \times 10^{-4} \text{ сут}^2/\text{м}^6.$$
 При таком весовом коэффициенте взвешенная невязка эвапотранспирации составит 5665 д.е. Для поиска оптимального значения ω_{PR} используется подбор. Модель была несколько раз перекалибрована с одинаковыми настройками, изменялось только значение весового коэффициента априорной информации. Кроме первичного значения ω_{PR} , были проверены варианты, отличающиеся на порядок, а именно: 1×10^{-3} ; 3.3×10^{-4} ; 1×10^{-4} ; 3.3×10^{-5} ; 1×10^{-5} сут²/м⁶.

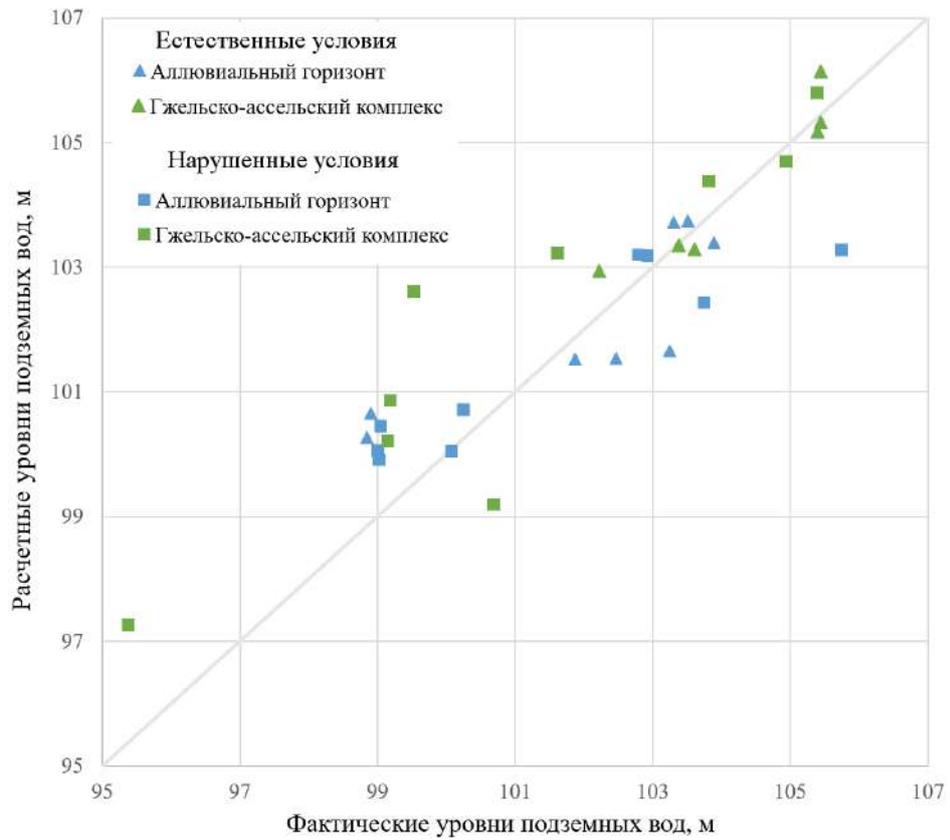


Рисунок 5.21. Сопоставление расчетных и фактических уровней подземных вод после завершения первой итерации калибровки.

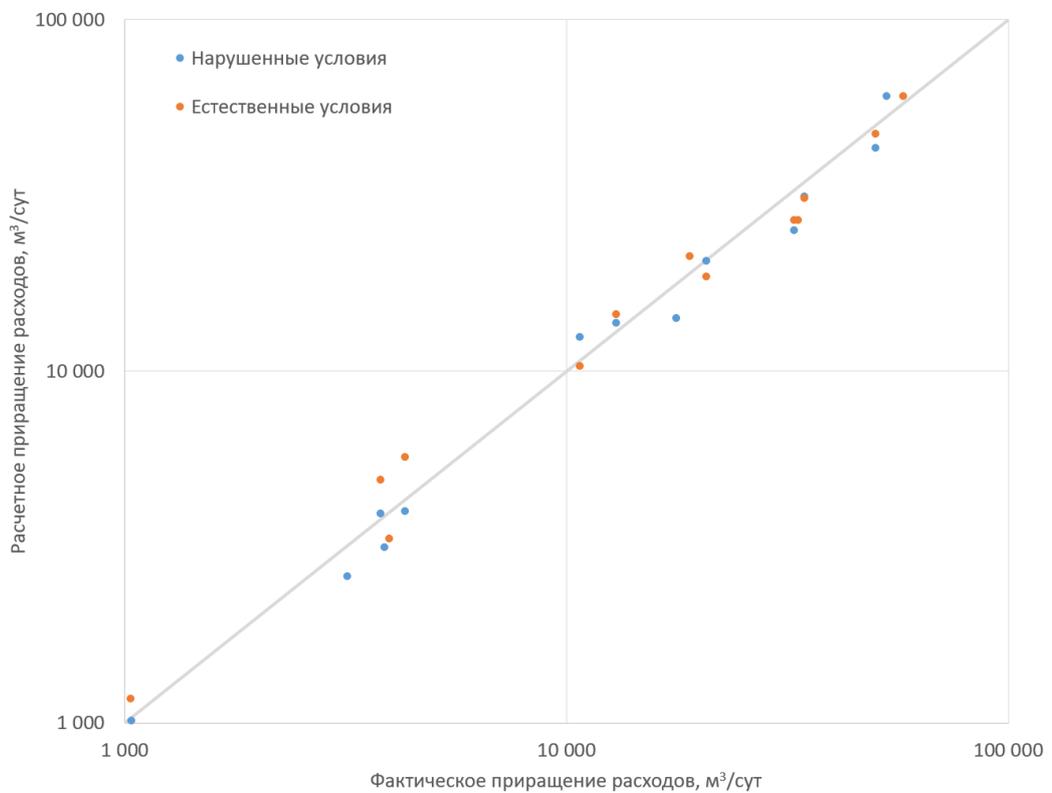


Рисунок 5.22. Сопоставление расчетных и фактических приращений расходов по створам после завершения первой итерации калибровки.

После проверки всех вариантов оптимальным признано значение ω_{PR} , равное 3.3×10^{-4} сут²/м⁶. В этом варианте на откалиброванной модели получены следующие показатели:

- величина сокращения эвапотранспирационной разгрузки составила 13924 м³/сут или 26% от дебита водозабора;
- невязка расхода р. Судогды на замыкающем створе составляет 6%;
- средняя невязка по уровням составила -0.3 м, стандартное отклонение 2.7 м;

Дальнейшее увеличение весового коэффициента для эвапотранспирации нецелесообразно, поскольку приводит к получению заведомо некорректного решения. При некотором снижении невязки расходов эвапотранспирации невязка расходов на замыкающем створе р. Судогда превышает 10%, стандартное отклонение невязок уровней превышает 4 м.

Таким образом, за счет выполнения нескольких попыток калибровки и корректировки весовых коэффициентов в ходе работы над моделью, удалось объединить три типа данных – расходы рек, уровни подземных вод и изменение эвапотранспирационной разгрузки. Откалиброванная таким образом модель наиболее точно воспроизводит балансовую структуру водоотбора и имеющиеся наблюдения по сравнению с ранее разработанными вариантами [92,160].

5.3. Выводы по главе 5

В двух рассмотренных примерах модели разрабатывались с различными целями и с использованием несколько различающихся наблюдений разного типа, что позволило использовать для каждого из объектов подход одномодельной совместной калибрации на основе двух типов наблюдений.

Модель бассейна р. Хворостань разрабатывалась, в первую очередь, для расчета прогнозных понижений в водозаборных скважинах перспективных водозаборов и оценки ущерба р. Хворостань. Эта цель определила выбор в качестве наблюдений замеров расхода реки в самый маловодный год. Используемые замеры расходов и уровней учитывались при калибрации, по возможности, в равной степени. Весовые коэффициенты, рассчитанные по формуле (2.5), не требовали дальнейшей корректировки. Совместная калибрация позволила одновременно откалибровать параметры питания и проводимости донных отложений, и использовать разработанную модель при прогнозировании сокращения речного стока [33].

Модель бассейна р. Судогды разрабатывалась для изучения формирования баланса уже действующего водозабора. По этой причине в целевую функцию была напрямую введена величина одной из статей водного баланса в качестве априорной информации. Начальные значения весовых коэффициентов потребовали изменения за счет корректировки величины предусмотренного в формуле (2.5) поправочного коэффициента α . Оптимальные значения весовых коэффициентов подбирались с учетом значения как всей целевой функции S , так и ее составляющих – сумм взвешенных невязок по отдельным типам наблюдений. Потребовалось выполнение нескольких этапов калибрации для подбора оптимального сочетания параметров. Совместная калибрация позволила воспроизвести на модели известный баланс потока подземных вод и обосновать возможность использования этой модели для прогноза изменения баланса подземных вод при изменении климата [92].

Таким образом, полученные для этих объектов результаты свидетельствуют, что применение метода совместной одномодельной калибрации разных типов наблюдений является перспективным приемом при обосновании моделей взаимосвязи поверхностных и подземных вод в бассейнах малых рек.

Заключение

Калибровка является важным этапом работы над моделью и выполняется вручную или с помощью специализированных компьютерных программ. Чаще всего калибровка заключается в подборе параметров модели с целью воспроизведения известного состояния водоносного горизонта. Ручная калибровка чаще применяется для простых геофильтрационных схем с небольшим количеством параметров, автоматическая применяется в более сложных случаях. При этом автоматическая калибровка не является самодостаточной. В практике используется промежуточный вариант, который можно назвать полуавтоматической калибровкой, когда результаты автоматизированного подбора параметров контролируются и корректируются специалистом. Именно этот вариант калибровки является перспективным рабочим инструментом, и он развивается в настоящей работе с использованием существующих общедоступных средств автоматической калибровки.

Для калибровки моделей гидрогеологических процессов могут быть использованы различные типы данных, такие как замеры уровней (напоров), температуры подземных вод, концентраций растворенных веществ, расходов поверхностных вод. Использование этих данных совместно в рамках единой функции, определяющей качество воспроизведения моделью (моделями) реальных условий, позволяет ввести понятие совместной калибровки. В работе проведена типизация условий применимости совместной калибровки и разработана методика ее применения для решения с помощью моделирования практических задач охраны и использования подземных вод. На тестовых примерах показано, что совместная калибровка моделей при одновременном использовании данных различных типов и моделей различных процессов может быть эффективнее последовательной калибровки.

Для верификации разработанной методики совместной калибровки рассмотрены следующие типовые для практики гидрогеологического прогнозирования ситуации:

1. Совместное использование замеров уровней подземных вод и концентраций загрязнителей в них для калибровки моделей геофильтрации и геомиграции при решении задач охраны подземных вод от загрязнения.
2. Совмещение разномасштабных данных режимных наблюдений за уровнями и краткосрочных замеров понижений для калибровки геофильтрационных моделей, разрабатываемых для переоценки запасов подземных вод эксплуатируемых участков месторождений.
3. Совместное использование замеров расходов рек и уровней подземных вод для калибровки геофильтрационных моделей, разрабатываемых для оценки естественных и эксплуатационных ресурсов подземных вод в бассейнах малых рек.

Каждая из проанализированных ситуаций – обобщение результатов гидрогеологических исследований на реальных объектах.

Для первого случая на тестовой модели реального объекта в районе Сибирского Химического Комбината показано, что последовательная калибровка с отдельным рассмотрением моделей геофильтрации и геомиграции в многопластовом потоке подземных вод не позволяет подобрать удовлетворительный набор значений параметров и воспроизвести наблюдения за концентрациями мигрирующего от локального источника загрязнения. Совместная калибровка этих двух моделей позволила воспроизвести оба типа наблюдений, при этом подобранные значения геофильтрационных параметров и активной пористости пород оказались очень близки к «истинным».

Для второго случая на примере одного из водозаборов г. Воронежа определены особенности совместной калибровки разномасштабных геофильтрационных моделей. Использование большего количества наблюдений при едином для всех моделей наборе параметров позволило увеличить количество калибруемых параметров и оценить их пространственную неоднородность. Применение совместной калибровки позволило согласовать и учесть разномасштабные по времени замеры, а именно наблюдения в процессе кустовых опытных откачек и многолетний мониторинг подземных вод при эксплуатации водозабора и обосновать прогнозную геофильтрационную модель для выполнения переоценки запасов, чего не удавалось достичь при использовании стандартного подхода к калибровке.

Для третьего случая на примерах потоков подземных вод в долинах малых рек Хворостань и Судогда совместная калибровка позволила одновременно откалибровать параметры питания подземных вод и проводимости донных отложений. Это позволило использовать разработанные модели при прогнозировании взаимосвязи подземных и поверхностных вод и изменения речного стока в связи с водоотбором (для бассейна р. Хворостань) и с учетом ожидаемых изменений климата (для бассейна р. Судогда). Полученные для рассмотренных объектов результаты свидетельствуют, что применение метода совместной одномодельной калибровки разных типов наблюдений является перспективным приемом при обосновании моделей взаимосвязи поверхностных и подземных вод в бассейнах малых рек.

Таким образом, как на результатах тестовых примеров, так и на результатах работ, выполненных для реальных объектов в различных гидрогеологических условиях показана эффективность применения разработанной методики для различных типовых ситуаций применения методов совместной калибровки и принципиальная возможность ее применения для широкого круга прикладных модельно-ориентированных задач гидрогеологических исследований охраны и использования подземных вод.

Список литературы

Опубликованная

1. Бакшевская, В. А. Обоснование эффективных параметров прогнозных моделей геомиграции в неоднородной водовмещающей среде (на примере полигона захоронения жидких отходов Сибирского химического комбината): специальность 25.00.07 "Гидрогеология": автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук // Бакшевская Вероника Анатольевна. – Москва, 2013. – 24 с.
2. Боровский, Б. В. Методика определения параметров водоносных горизонтов по данным откачек / Б.В. Боровский, Б.Г. Самсонов, Л.С. Язвин. – М.: Недра, 1973. – 304 с.
3. Боровский, Б. В. Оценка запасов подземных вод // Б.В. Боровский, Н.И. Дробноход, Л.С. Язвин – Киев: Высшая школа. – 1989. – 407 с.
4. Боровский, Б.В. Повышение водообеспеченности г. Владивостока за счет использования подземных вод в маловодные периоды при форсированном водоотборе / Б.В. Боровский, Н.С. Козак, А.Г. Черняк // Водные ресурсы. – 2012. – Т. 39. – №. 6. – С. 608-623.
5. Ван, Пин. Гидрогеодинамические исследования на участках береговых водозаборов вблизи водохранилища: специальность 25.00.07 "Гидрогеология": автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук // Ван Пин. – Москва, 2008. – 24 с.
6. Ван, Пин. Интерпретация опытных откачек в потоке грунтовых вод у реки с использованием методов численного моделирования / Ван Пин, В.М. Шестаков // Вестник Московского университета. Серия 4: Геология. – 2008. – № 4. – С. 70–73.
7. Веригин, Н. Н. Методы определения фильтрационных свойств горных пород / Н.Н. Веригин. – М.: Госстройиздат, 1962. – 180 с.
8. Голицын, М. С. Основные результаты региональных гидрогеологических, инженерно-геологических, геокриологических и геоэкологических работ / М.С. Голицын, В.А. Дубровин, Т.А. Конюхова // Разведка и охрана недр. – 2014. – №. 8. – С. 11-15.
9. Гороховский, В. М. Эффективные параметры гидрогеологических моделей / Викентий Михайлович Гороховский. – М.: ЗАО «ГИДЭК». – 2013. - 230 с.
10. Гилл Ф. Практическая оптимизация / Ф. Гилл, У. Мюррей, М. Райт. – М.: Мир, 1985. – 509 с.
11. Глинский, М.Л. Моделирование последствий эксплуатации полигона глубинного захоронения жидких радиоактивных отходов Сибирского химического комбината на среднесрочный и сверхдолгосрочный периоды / М.Л. Глинский, С.П. Поздняков, Л.Г. Черткова [и др.] // Радиохимия. – 2014. – Т.56 №6. – с.554–560.

12. Гриневский, С.О. Принципы региональной оценки инфильтрационного питания подземных вод на основе геогидрологических моделей / С.О. Гриневский, С.П. Поздняков // Вод. ресурсы. 2010. – Т. 37. № 5. – с. 543–557.
13. Гриневский, С. О. Гидрогеодинамическое моделирование взаимодействия подземных и поверхностных вод / Сергей Олегович Гриневский. Москва: Инфра-М, 2012. – 152 с.
14. Гриневский, С.О. Особенности формирования балансовой структуры эксплуатационного отбора подземных вод и его влияния на речной сток при снижении уровней грунтовых вод / С.О. Гриневский, В.С. Спорышев // Водные ресурсы. — 2019. — Т. 46, № 3. — С. 247–258.
15. Данилов, В. В. Математическое моделирование глубинного захоронения жидких радиоактивных отходов (на примере Сибирского химического комбината): специальность 25.00.07 "Гидрогеология": автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук // Данилов Владислав Владимирович – Томск, 2010. – 22 с.
16. Елецких, В. Л. Вода и люди: История и день сегодняшний / В.Л. Елецких, В.И. Щербаков. – Воронеж: Творческое объединение «Альбом». – 2004. – Т. 248.
17. Ершов, Г. Е. Оценка эксплуатационных запасов подземных вод на отдельных участках нефтяных месторождений с использованием постоянно-действующих моделей / Г.Е. Ершов, С.С. Палкин, А.В. Фортыхин // Разведка и охрана недр. – 2005. – №. 11. – С. 33-35.
18. Ершов, Г. Е. Анализ условий формирования и эксплуатации пресных подземных вод Троицкого месторождения (г. Элиста) / Г.Е. Ершов // Разведка и охрана недр. – 2014. – №. 5. – С. 61-66.
19. Зинюков, Ю.М. Естественные ресурсы подземных вод западной части Воронежской области / Ю.М. Зинюков, П.А. Панарин, А.А. Сергатских, Ю.А. Устименко // Вестник ВГУ. Серия: Геология. – 2014. – № 1. – С. 122-129.
20. Зубков, А.А. Анализ системы геотехнологического мониторинга полигона подземного захоронения жидких радиоактивных отходов СХК / А.А. Зубков, А.И. Рыбальченко, В.Г. Румынин [и др.] // Разведка и охрана недр. – 2007. – № 11. – С. 56-61.
21. Казак, Е.С. Формирование железа в подземных водах водозаборных участков по данным экспериментальных исследований и геомиграционного моделирования: специальность 25.00.07 "Гидрогеология": автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата геолого-минералогических наук // Казак Екатерина Сергеевна. – Москва, 2010. – 24 с.
22. Капырин, И.В. Концепция разработки и использования расчетного комплекса GeRa для обоснования безопасности пунктов захоронения радиоактивных отходов / И.В. Капырин, С.С. Уткин, Ю.В. Василевский // Вестник атомной науки и техники, серия «Математическое моделирование физических процессов», – 2014 – №4 – С.44-54.

23. Карасев, И.Ф. Гидрометрия : учебник / И.Ф. Карасев, И.Г. Шумков. – Л.: Гидрометеиздат. – 1985. – 384 с.
24. Квон, Д.А. Гидрогеофизические исследования в окрестностях реки Хворостань (Воронежская область) / Д.А. Квон, Н.Н. Муромец, Д.К. Большаков [и др.] // Инженерные изыскания. – 2016. – № 13. – С. 38–43.
25. Куделин, Б. И. Принципы региональной оценки естественных ресурсов подземных вод / Борис Иванович Куделин. – М.: Издательство Московского университета, 1966 – 344 с.
26. Кобзарь, А. И. Прикладная математическая статистика / А.И. Кобзарь. – М.: Физматлит. – 2006. – 813 с.
27. Лукнер, Л. Моделирование геофильтрации / Л. Лукнер, В.М. Шестаков. – М.: Недра, 1976.
28. Ломакин, Е. А. Численное моделирование геофильтрации / Е.А. Ломакин, В.А. Мироненко, В.М. Шестаков. – М.: Недра, 1988. – 228 с.
29. Мироненко, В. А. Опыт-миграционные работы в водоносных пластах / В.А. Мироненко, В.Г. Румынин. – М.: Недра, 1986. – 280 с.
30. Мироненко, В. А. Проблемы гидрогеоэкологии. В 3 томах. Том 2. Опыт-миграционные исследования / В.А. Мироненко, В.Г. Румынин. – Москва: Издательство МГГУ, 1999. – 394 с.
31. Мироненко, В. А. Проблемы гидрогеоэкологии. В 3 томах. Том 3 (книга 2). Прикладные исследования / В.А. Мироненко, В.Г. Румынин. – Москва: Издательство МГГУ, 1999. – 504с.
32. Мироненко, В. А. Теория и методы интерпретации опыт-фильтрационных работ / В.А. Мироненко, В.М. Шестаков. – М.: Недра, 1978. – 325 с.
33. Муромец Н. Н. Влияние фильтрационной неоднородности донных отложений на разгрузку подземных вод в бассейне малой реки в естественных и нарушенных условиях / Н.Н. Муромец, В.Н. Самарцев, А.А. Хакимова, П.Ю. Василевский. – Вестник Московского университета. Серия 4: Геология. – 2018. – №1. – С. 89–98.
34. Поздняков, С.П. Модельный анализ наблюдаемых и прогнозных климатических изменений инфильтрационного питания подземных вод в бассейне малой реки / С.П. Поздняков, С.О. Гриневский, Е.А. Дедюлина, В.Н. Самарцев // Вестник Московского университета. Серия 4: Геология. — 2019. — № 3. — С. 78–86.
35. Попов, О. В. Подземное питание рек / О.В. Попов. – Л.: Гидрометеиздат, 1968. – 291 с.
36. Рыбальченко, А.И. Глубинное захоронение жидких радиоактивных отходов / А.И. Рыбальченко, М.К. Пименов, П.П. Костин [и др.] // М.: ИздАТ, 1994 – 256 с.
37. Самарцев, В.Н. Влияние вертикальной геофильтрационной неоднородности на результаты моделирования миграции загрязнения в латеральном потоке подземных вод / В.Н. Самарцев // Вестник Московского университета. Серия 4: Геология. – 2012. – Т. 67. – № 6. – С. 374–377.

38. Самарцев, В.Н. Опыт калибровки геофильтрационной модели берегового водозабора путем совместного использования данных опытно-фильтрационных работ и результатов мониторинга в период эксплуатации / В.Н. Самарцев, С.П. Поздняков // Инженерная геология. – 2017. – № 3 – С. 36–43.
39. Синдаловский, Л.Н. Справочник аналитических решений для интерпретации опытно-фильтрационных опробований / Л.Н. Синдаловский. – СПб.: Издательство Санкт-Петербургского университета, 2006. – 769 с.
40. Синдаловский, Л. Н. ANSDIMAT-программный комплекс для определения параметров водоносных пластов / Л.Н. Синдаловский. – СПб.: Наука. –2011. – 335 с.
41. Стренг, Г. Линейная алгебра и ее применения / Г. Стренг. – Мир, 1980. – 454 с.
42. Теребиж, В.Ю. Введение в статистическую теорию обратных задач / В.Ю. Теребиж. – М.: Физматлит, 2005. – 375 с.
43. Тихонов, А.Н. Методы решения некорректных задач / А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин. – М.: Наука, 1979. - 285 с.
44. Фролова, Ю.В. Влияние условий испытаний на прочность образцов известняка при одноосном сжатии / Ю.В. Фролова, Я.А. Аракчеева // Инженерная геология. – 2012. – №1. – с. 56-67.
45. Холмовой, Г.В. История развития речной сети Верхнего Дона в плиоцене и плейстоцене по результатам палеопотамологического анализа. / Г.В. Холмовой // Возраст и генезис переуглублений на шельфах и история речных долин / АН СССР, Комиссия по изучению четвертичного периода, Институт геологии Башкирский филиал АН СССР; отв. ред. М.Н. Алексеев, Н.И. Николаев, В.Л. Яхимович. – М.: Наука, 1984. – С. 77-83.
46. Холмовой, Г.В. Эрозия и аллювиальный процесс в новейшей геологической истории на примере бассейна Дона / Г.В. Холмовой, Ю.А. Лаврушин, В.Г. Шпуль // Вестник ВГУ. Серия: Геология. – 2007. – № 2. – С.37-49.
47. Глинский М.Л. Программный комплекс "нимфа": перспективы развития / М.Л. Глинский, А.А. Куваев, С.Е. Власов [и др.] // Разведка и охрана недр. – 2013. – № 10. – С. 48-51.
48. Шестаков, В.М. Учет геологической неоднородности - важная задача гидрогеологии / В.М. Шестаков // Вестник Московского университета. Сер. 4: Геология. – 2003. – №1. – с. 25-28.
49. Шестаков, В.М. Гидрогеодинамический мониторинг / В.М. Шестаков, Ван Пин // Вестник Московского университета. Серия 4: Геология. – 2004. – №1.
50. Шестаков, В.М. Гидрогеодинамика / В.М. Шестаков. – М.: Изд-во КД МГУ, 1995. – 368 с.
51. Шестаков, В. М. Геогидрология / В.М. Шестаков, С.П. Поздняков. – М.: Академкнига. – 2003. – 176 с.
52. Abarca, E. Optimal design of measures to correct seawater intrusion / E. Abarca, E. Vazquez-Suñe, J. Carrera // Water resources research. – 2006. – Vol. 42. – № 9. – p. 1-14.

53. Ahmed, A.S. HT2DINV: A 2D forward and inverse code for steady-state and transient hydraulic tomography problems / A.S. Ahmed, A. Jardani, A. Revil, J.P. Dupont // *Computers & Geosciences*. – 2015. – Vol. 85. – p. 36-44.
54. Alcolea, A. Regularized pilot points method for reproducing the effect of small-scale variability: Application to simulations of contaminant transport / A. Alcolea, J. Carrera, A. Medina // *Journal of hydrology*. – 2008. – Vol. 355. – №. 1. – C. 76-90.
55. Anderman, E.R. A new multistage groundwater transport inverse method: Presentation, evaluation, and implications / E.R. Anderman, M.C. Hill // *Water resources research*. – 1999. – Vol. 35. – №. 4. – C. 1053-1063.
56. Anderson, M.P. Heat as a ground water tracer / M.P. Anderson // *Ground water*. – 2005. – Vol. 43. – №. 6. – C. 951-968.
57. Anderson, M.P. Applied groundwater modeling: simulation of flow and advective transport / M.P. Anderson, W.W. Woessner, R.J. Hunt. – Academic press, 2015. – 602 p.
58. Arnold, J.G. Regional estimation of base flow and groundwater recharge in the Upper Mississippi river basin / J.G. Arnold, R.S. Muttiah, R. Srinivasan, P.M. Allen // *Journal of Hydrology*. – 2000. – Vol. 227. – №. 1. – C. 21-40.
59. Beck, J. V. Parameter estimation in engineering and science / J. V. Beck, K. J. Arnold. – John Wiley & Sons, 1977. – 501 p.
60. Becker, M.W. Potential for satellite remote sensing of ground water / M.W. Becker // *Ground water*. – 2006. – Vol. 44. – №. 2. – C. 306-318.
61. Bianchi, M. SGeMS: A Free and Versatile Tool for Three-Dimensional Geostatistical Applications / M. Bianchi, C. Zheng // *Ground water*. – 2009. – Vol. 47. – №. 1. – C. 8-12.
62. Bravo, H.R., Jiang F., Hunt R. J. Using groundwater temperature data to constrain parameter estimation in a groundwater flow model of a wetland system / H.R. Bravo, F. Jiang, R.J. Hunt // *Water Resources Research*. – 2002. – Vol. 38. – №. 8.
63. Carrera, J. Inverse problem in hydrogeology / J. Carrera, A. Alcolea, A. Medina [et al.] // *Hydrogeology journal*. – 2005. – Vol. 13. – №. 1. – C. 206-222.
64. Certes, C. Application of the pilot point method to the identification of aquifer transmissivities / C. Certes, G. de Marsily // *Advances in Water Resources*. – 1991. – Vol. 14. – №. 5. – C. 284-300.
65. Chiang, W. H. 3D-groundwater modeling with PMWIN. / W.H. Chiang. – Berlin, Heidelberg, New York: Springer-Verlag, 2005. – 415 p.
66. Christensen, S. Predictive error dependencies when using pilot points and singular value decomposition in groundwater model calibration / S. Christensen, J. Doherty // *Advances in Water Resources*. – 2008. – Vol. 31. – №. 4. – C. 674-700.
67. Christakos, G. A sociological approach to the state of stochastic hydrogeology / G. Christakos // *Stochastic Environmental Research and Risk Assessment*. – 2004. – Vol. 18. – №. 4. – C. 274-277.

68. Comunian, A. 3D multiple-point statistics simulation using 2D training images / A. Comunian, P. Renard, J. Straubhaar // *Computers & Geosciences*. – 2012. – Vol. 40. – C. 49-65.
69. Comunian, A. Training images from process-imitating methods / A. Comunian, S.K. Jha, B. Giambastiani // *Mathematical Geosciences*. – 2014. – Vol. 46. – №. 2. – C. 241-260.
70. Cooley, R. L. A theory for modeling ground-water flow in heterogeneous media / R.L. Cooley. – Reston, Va., US Geological Survey, Professional Paper №1679, 2004. – 220 p.
71. Dagan, G. An overview of stochastic modeling of groundwater flow and transport: From theory to applications / G. Dagan // *Eos, Transactions American Geophysical Union*. – 2002. – Vol. 83. – №. 53. – C. 621-625.
72. Diersch, H. J. FEFLOW: finite element modeling of flow, mass and heat transport in porous and fractured media / Hans-Jorg G. Diersch. – Springer Science & Business Media, 2013. – 1018 p.
73. Doherty, J. PEST Groundwater Data Utilities / J. Doherty // Brisbane, Australia: Watermark Numerical Computing, 2001.
74. Doherty, J. Calibration and uncertainty analysis for complex environmental models / J. Doherty. – Watermark Numerical Computing, 2015. – 227 p.
75. Duffield, G. M. AQTESOLV for Windows Version 4.5: User's Guide / G.M. Duffield. – Reston, Va.: HydroSOLVE. – 2007.
76. Dupuit, J. Mouvement de l'eau a travers le terrains permeables / J. Dupuit // *C. R. Hebd. Seances Acad. Sci.* – 1857. – Vol. 45. – p. 92-96.
77. Eckhardt, K. Automatic model calibration / K. Eckhardt, N. Fohrer, H.G. Frede // *Hydrological Processes: An International Journal*. – 2005. – Vol. 19. – №. 3. – p. 651-658.
78. Emsellem, Y. An automatic solution for the inverse problem / Y. Emsellem, G. de Marsily // *Water Resources Research*. – 1971. – Vol. 7. – №. 5. – p. 1264-1283.
79. Engl, H. W. Regularization of inverse problems / H.W. Engl, M. Hanke, A. Neubauer. – Springer Science & Business Media, 1996. – Vol. 375.
80. Farmer, C. L. Upscaling: a review / C.L. Farmer // *International Journal for Numerical Methods in Fluids*. – 2002. – Vol. 40. – №. 1-2. – p. 63-78.
81. Flavelle, P. A quantitative measure of model validation and its potential use for regulatory purposes / P.A. Flavelle // *Advances in water resources*. – 1992. – Vol. 15. – №. 1. – p. 5-13.
82. Franssen, H. J. H. Joint simulation of transmissivity and storativity fields conditional to steady-state and transient hydraulic head data/ H.J.H. Franssen, J.J. Gómez-Hernández, J.E. Capilla, A. Sahuquillo // *Advances in water resources*. – 1999. – Vol. 23. – №. 1. – p. 1-13.
83. Franssen, H. J. H. A comparison of seven methods for the inverse modelling of groundwater flow. Application to the characterisation of well catchments / H.J.H. Franssen // *Advances in Water Resources*. – 2009. – Vol. 32. – №. 6. – p. 851-872.

84. Freeze, R.A. A stochastic-conceptual analysis of one-dimensional groundwater flow in nonuniform homogeneous media / R.A. Freeze // *Water Resources Research*. – 1975. – Vol. 11. – №. 5. – p. 725-741.
85. Freyberg, D. L. An exercise in ground-water model calibration and prediction/ D.L. Freyberg // *Groundwater*. – 1988. – Vol. 26. – №. 3. – p. 350-360.
86. Gailey, R. M. Coupled process parameter estimation and prediction uncertainty using hydraulic head and concentration data / R.M. Gailey, A.S. Crowe, S.M. Gorelick // *Advances in Water Resources*. – 1991. – Vol. 14. – №. 5. – p. 301-314.
87. Gelhar, L.W. *Stochastic Subsurface Hydrology* / L.W. Gelhar. - Prentice Hall PTR, 1993. - 390 p.
88. Ginn, T. R. Notes on groundwater age in forward and inverse modeling/ T.R. Ginn, H. Haeri, A. Massoudieh, L. Foglia, // *Transport in porous media*. – 2009. – Vol. 79. – №. 1. – p. 117-134.
89. Goderniaux, P. Partitioning a regional groundwater flow system into shallow local and deep regional flow compartments / P. Goderniaux, P. Davy, E. Bresciani [et al.] // *Water Resources Research*. – 2013. – Vol. 49. – №. 4. – p. 2274-2286.
90. Gómez-Hernández, J. J. Stochastic simulation of transmissivity fields conditional to both transmissivity and piezometric data – I. Theory / J.J. Gómez-Hernández, A. Sahuquillo, J.E. Capilla // *Journal of Hydrology*. – 1997. – Vol. 203. – №. 1. – p. 162-174.
91. Goode, D. J. Direct simulation of groundwater age / D.J. Goode // *Water Resources Research*. – 1996. – Vol. 32. – №. 2. – p. 289-296.
92. Grinevskiy, S. Evapotranspiration capture and stream depletion due to groundwater pumping under variable boreal climate conditions: Sudogda river basin, Russia / S. Grinevskiy, E. Filimonova, V. Sporyshev [et al.] // *Hydrogeology Journal*. – 2018. – Vol.26 – №8. – p. 2753-2767
93. Guo, W. User's guide to SEAWAT: a computer program for simulation of three-dimensional variable-density ground-water flow / W. Guo, C.D. Langevin. – USGS, 2002. – *Techniques of Water-Resources Investigations*, 06-A7. – 77 p.
94. Haitjema, H. M. Analytic element modeling of groundwater flow / H.M. Haitjema // Elsevier, 1995. – 393 p.
95. Hansen, P. C. The truncated SVD as a method for regularization / P.C. Hansen // *BIT Numerical Mathematics*. – 1987. – Vol. 27. – №. 4. – p. 534-553.
96. Harbaugh, A. W. MODFLOW-2005, the US Geological Survey modular ground-water model: the ground-water flow process / A.W. Harbaugh. – Reston, VA: US Geological Survey, 2005. – *Techniques and Methods* 6-A16.
97. Hayley, K. Highly parameterized model calibration with cloud computing: an example of regional flow model calibration in northeast Alberta, Canada / K. Hayley, J. Schumacher, G.J. MacMillan, L.C. Boutin // *Hydrogeology Journal*. – 2014. – Vol. 22. – №. 3. – p. 729-737.

98. Hill, M.C. The practical use of simplicity in developing ground water models / M.C. Hill // *Groundwater*. – 2006. – Vol. 44. – №. 6. – p. 775-781.
99. Hill, M. C. Effective groundwater model calibration: with analysis of data, sensitivities, predictions, and uncertainty / M.C. Hill, C.R. Tiedeman. – John Wiley & Sons, 2006.
100. Hoeksema, R. J. An application of the geostatistical approach to the inverse problem in two-dimensional groundwater modeling / R.J. Hoeksema, P.K. Kitanidis // *Water Resources Research*. – 1984. – Vol. 20. – №. 7. – p. 1003-1020.
101. Hunt, R. J. Are models too simple? Arguments for increased parameterization / R.J. Hunt, J. Doherty, M.J. Tonkin // *Groundwater*. – 2007. – Vol. 45. – №. 3. – p. 254-262.
102. Hunt, R. J. The current state of modeling / R.J. Hunt, C. Zheng // *Groundwater*. – 2012. – Vol. 50. – №. 3. – p. 330-333.
103. Jurgens, B.C. TracerLPM (Version 1): An Excel® workbook for interpreting groundwater age distributions from environmental tracer data / B.C. Jurgens, J.K. Böhlke, S.M. Eberts // *US Geological Survey Techniques and Methods Report 4-F3*. – 2012. – 60 p.
104. Kalin, R.M. Radiocarbon dating of groundwater systems / R.M. Kalin // *Environmental tracers in subsurface hydrology*. – Springer US, 2000. – p. 111-144.
105. Kitanidis, P.K. A geostatistical approach to the inverse problem in groundwater modeling (steady state) and one-dimensional simulations / P.K. Kitanidis, E.G. Vomvoris // *Water resources research*. – 1983. – Vol. 19. – №. 3. – p. 677-690.
106. Klaas, D.K. Investigating the impact of the properties of pilot points on calibration of groundwater models: case study of a karst catchment in Rote Island, Indonesia / D.K. Klaas, M.A. Imteaz // *Hydrogeology Journal*. – 2017. – Vol. 25. – №. 6. – p. 1703-1719.
107. Ferris, J.G. Theory of aquifer tests / J.G.Ferris, D.B. Knowles, R.H. Brown, R.W. Stallman. – Denver, Colorado: USGS Water-Supply paper 1536-E, 1962. – p. 69-174.
108. Konikow, L.F. Ground-water models cannot be validated / L.F. Konikow, J.D. Bredehoeft // *Advances in water resources*. – 1992. – Vol. 15. – №. 1. – p. 75-83.
109. Kowalsky, M.B. On parameterization of the inverse problem for estimating aquifer properties using tracer data / M.B. Kowalsky, S. Finsterle, K.H. Williams [et al.] // *Water Resources Research*. – 2012. – Vol. 48. – №. 6. – 25 p.
110. Larocque M. Estimating flow using tracers and hydraulics in synthetic heterogeneous aquifers / M. Larocque, P.G. Cook, K. Haaken // *Ground water*. – 2009. – Vol. 47. – №. 6. – p. 786-796.
111. La Vigna, F. Can we calibrate a complex groundwater model just running an automatic estimation code? The Acque Albule model case, Rome (Italy) / F. la Vigna, R. Rossetto, R. Mazza, G. Capelli // *Managing Groundwater and the Environment*, Ge S., Hill M.C., Wang Y., Zheng C. (eds). IAHS Publ.: IHAS Press, Wallingford, Oxfordshire (UK). – 2011. – Vol. 341. – p. 51-56.

112. Li, L. Jointly mapping hydraulic conductivity and porosity by assimilating concentration data via ensemble Kalman filter / L. Li, H. Zhou, J.J. Gómez-Hernández, H.J.H. Franssen // *Journal of hydrology*. – 2012. – Vol. 428. – p. 152-169.
113. Mariethoz, G. Modeling complex geological structures with elementary training images and transform-invariant distances / G. Mariethoz, B.F.J. Kelly // *Water Resources Research*. – 2011. – Vol. 47. – №. 7.
114. De Marsily, G. et al. Interpretation of interference tests in a well field using geostatistical techniques to fit the permeability distribution in a reservoir model / G. de Marsily, G. Lavedan, M. Boucher, G. Fasamino // *Geostatistics for natural resources characterization, Part 2*. – 1984. – Vol. 2. – p. 831-849.
115. McDonald, M.G. The history of MODFLOW / M.G. McDonald, A.W. Harbaugh // *Ground water*. – 2003. – Vol. 41. – №. 2. – p. 280-283.
116. McMahon, P. B. A comparison of recharge rates in aquifers of the United States based on groundwater-age data / P.B. McMahon, L.N. Plummer, J.K. Böhlke [et al] // *Hydrogeology Journal*. – 2011. – Vol. 19. – №. 4. – p. 779-800.
117. Murphy, S. Tritium–helium groundwater age used to constrain a groundwater flow model of a valley-fill aquifer contaminated with trichloroethylene (Quebec, Canada) / S. Murphy, T. Ouellon, J.M. Ballard [et al.] // *Hydrogeology journal*. – 2011. – Vol. 19. – №. 1. – p. 195-207.
118. Palma, H.C. A regional-scale groundwater flow model for the Leon-Chinandega aquifer, Nicaragua / H.C. Palma, L.R. Bentley // *Hydrogeology J*. – 2007. – Vol. 15. – №. 8. – p. 1457-1472.
119. Park, J. Transport modeling applied to the interpretation of groundwater ^{36}Cl age / J. Park, C.M. Bethke, T. Torgersen, T.M. Johnson // *Water Resources Research*. – 2002. – Vol. 38. – №. 5.
120. Poeter, E.P. UCODE_2005 and Six Other Computer Codes for Universal Sensitivity Analysis, Calibration, and Uncertainty Evaluation / E.P. Poeter, M.C. Hill, E.R. Banta [et al.]. – USGS Techniques and Methods 6-A11, 2005. – 283 p.
121. Prudic, D.E. Documentation of a computer program to simulate stream-aquifer relations using a modular, finite-difference, ground-water flow model / D.E. Prudic. – USGS open-file report 88-729, 1989. – 120 p.
122. R: A language and environment for statistical computing. / R Foundation for Statistical Computing, Vienna, Austria. URL: <https://www.R-project.org/> (дата обращения 12.03.2020).
123. Refsgaard, J.C. Parameterisation, calibration and validation of distributed hydrological models / J.C. Refsgaard // *Journal of hydrology*. – 1997. – Vol. 198. – №. 1-4. – p. 69-97.
124. Rehfeldt, K.R. Field study of dispersion in a heterogeneous aquifer: 3. Geostatistical analysis of hydraulic conductivity / K.R. Rehfeldt, J.M. Boggs, L.W. Gelhar // *Water Resources Research*. – 1992. – Vol. 28. – №. 12. – p. 3309-3324.

125. Remy, N. Applied geostatistics with SGeMS: A user's guide / N. Remy, A. Boucher, J. Wu. – Cambridge University Press, 2009.
126. Renard, P. Calculating equivalent permeability: a review / P. Renard, G. de Marsily // *Advances in Water Resources*. – 1997. – Vol. 20. – №. 5. – p. 253-278.
127. Royston, P. Remark AS R94: A remark on algorithm AS 181: The W-test for normality / P. Royston // *Journal of the Royal Statistical Society. Series C (Applied Statistics)*. – 1995. – Vol. 44. – №. 4. – p. 547-551.
128. Saleem, Z.A. Method for numerical simulation of flow in multiaquifer systems / Z.A. Saleem // *Water Resources Research*. – 1973. – Vol. 9. – №. 5. – p. 1465-1469.
129. Sanford, W. Calibration of models using groundwater age / W. Sanford // *Hydrogeology Journal*. – 2011. – Vol. 19. – №. 1. – p. 13-16.
130. Sayeed M. Efficient parallel implementation of hybrid optimization approaches for solving groundwater inverse problems / M. Sayeed, G.K. Mahinthakumar // *Journal of Computing in Civil Engineering*. – 2005. – Vol. 19. – №. 4. – p. 329-340.
131. Šimůnek J. The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media / J. Šimůnek, M. Šejna, H. Saito [et al.]. – Riverside, California: Prepr. Depart. of Environ. Sci. Univ. California Riverside, 2009. – 296 p.
132. Shapiro, S.S. A comparative study of various tests for normality / S.S. Shapiro, M.B. Wilk, H.J. Chen // *Journal of the American statistical association*. – 1968. – Vol.63. – № 324. – p.1343-1372.
133. Stallman, R. W. Aquifer-test design, observation and data analysis. / R.W. Stallman. – USGS. – 1971. – 26 p.
134. Sudicky, E.A. A natural gradient experiment on solute transport in a sand aquifer: Spatial variability of hydraulic conductivity and its role in the dispersion process / E.A. Sudicky // *Water Resources Research*. – 1986. – Vol. 22. – №. 13. – p. 2069-2082.
135. Sun, N.Z. Inverse problems in groundwater modeling / N.Z. Sun. – Springer, 1994. – 338 p.
136. Theis, C.V. The relation between the lowering of the Piezometric surface and the rate and duration of discharge of a well using ground-water storage / C.V. Theis // *Eos, Transactions American Geophysical Union*. – 1935. – Vol. 16. – №. 2. – p. 519-524.
137. Thode, H.C. Testing for normality / H.C. Thode // CRC press, 2002. – 368 p.
138. Thompson, G.M. Trichlorofluoromethane in groundwater – a possible tracer and indicator of groundwater age / G.M. Thompson, J.M. Hayes // *Water Resources Research*. – 1979. – Vol. 15. – №. 3. – p. 546-554.
139. Tonkin, M.J. A hybrid regularized inversion methodology for highly parameterized environmental models / M.J. Tonkin, J. Doherty // *Water Resources Research*. – 2005. – Vol. 41. – №. 10. – 16 p.

140. Wagner, B. J. Simultaneous parameter estimation and contaminant source characterization for coupled groundwater flow and contaminant transport modelling / B.J. Wagner // *Journal of Hydrology*. – 1992. – Vol. 135. – №. 1. – p. 275-303.
141. Watson, T.A. Parameter and predictive outcomes of model simplification / T.A. Watson, J. Doherty, S. Christensen // *Water Resources Research*. – 2013. – Vol. 49. – №. 7. – p. 3952-3977.
142. Wigley, T.M.L. Carbon 14 dating of groundwater from closed and open systems / T.M.L. Wigley // *Water Resources Research*. – 1975. – Vol. 11. – №. 2. – p. 324-328.
143. Winter, T.C. Relation of streams, lakes, and wetlands to groundwater flow systems / Winter, T.C. // *Hydrogeology Journal*. – 1999. – Vol. 7. – №. 1. – p. 28-45.
144. Yeh, W.W.G. Review of parameter identification procedures in groundwater hydrology: The inverse problem / W. W. G. Yeh // *Water Resources Research*. – 1986. – Vol. 22. – №.2. – p. 95-108.
145. Yeh, H.D. Applying hybrid heuristic approach to identify contaminant source information in transient groundwater flow systems / H.D. Yeh, C.C. Lin, B.J. Yang // *Mathematical Problems in Engineering*. – 2014. – 13 p.
146. Zheng C. MT3DMS: a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide / C. Zheng, P.P. Wang. – Alabama University, 1999.
147. Zhou, H. Inverse methods in hydrogeology: evolution and recent trends / H. Zhou, J.J. Gómez-Hernández, L. Li // *Advances in Water Resources*. – 2014. – Vol. 63. – p. 22-37.
148. Zhu, J. Characterization of aquifer heterogeneity using transient hydraulic tomography / J. Zhu, T.C.J. Yeh // *Water Resources Research*. – 2005. – Vol. 41. – №. 7.

Фондовая

149. Отчет о результатах предварительной и детальной разведок дополнительных источников водоснабжения г. Нововоронежа Воронежской области (подсчет запасов по состоянию на 01.09.2002г.) в 4-х книгах / О.В. Горб, Р.С. Штенгелов, С.В. Ляпин [и др.]. – Воронеж, 2002
150. Отчет по теме: Определение и картографирование инфильтрационного питания на опорных участках территории Воронежской области / Н.Н. Жильцова, И.С. Пашковский. – ЗАО “Геолинк-Консалтинг”. – Москва, 2002.
151. Отчет “Геологическая модель как основа для создания геомиграционной компьютерной модели первого от поверхности водоносного горизонта района поверхностных хранилищ жидких радиоактивных отходов СХК” / А.А. Зубков, В.В. Данилов, И.В. Данилов – Северск, 2008.

152. Отчет по теме: «Создание электронного атласа гидрогеологических карт приповерхностного водоносного комплекса на территорию промышленной и санитарно-защитной зон ОАО «СХК» / Т.И. Климова. – ЗАО «Геоспецэкология». – Москва, 2011.
153. Отчет о результатах работ по объекту "Переоценка запасов подземных вод на участке "Водозаборный узел I" Южно-Воронежского месторождения в Новоусманском районе Воронежской области (ВСП-21) (по состоянию изученности на 01.06.2016 г.) / С.В. Ляпин [и др.]. – ООО ВПФ "ПССВ". – Воронеж, 2017.
154. Отчет по теме: «Переоценка эксплуатационных запасов подземных вод Томского месторождения». Кн. 1 / Ю.В. Макушин [и др.]. – ОАО «Томскгеомониторинг». – Томск, 2005.
155. Отчет о геологическом и гидрогеологическом доизучении, инженерно-геологической съемке масштаба 1: 200000 с эколого-геологическими исследованиями на площади листа М-37-IV (Воронеж) / В.Н. Пархоменко, В.К. Бростовская – ООО «Воронежгеология». – Воронеж, 2000.
156. Отчет о результатах работ по созданию комплексного мониторинга подземных вод и окружающей среды в зоне влияния Судогодского водозабора / И.С.Пашковский, А.А. Жоров. – ТЦ «Владимиргеомониторинг», ЗАО «Геолинк-консалтинг». Владимир-Москва, 2002.
157. Отчет по теме «Геофильтрационное моделирование нового водозабора ВПС-4 на намывной площадке Воронежского водохранилища» / Поздняков С.П. [и др.]. – Москва, 2013.
158. Моделирование последствий эксплуатации полигона подземного захоронения жидких РАО комбината на сверхдолгосрочный период (Заключительный отчет) / Поздняков С.П. [и др.]. – Москва, 2013.
159. Отчет о детальной разведке подземных вод для водоснабжения г. Владимир (Судогодский участок) / А.М. Просеков – ТГФ «Центргеология». – Москва, 1977.
160. Переоценка запасов подземных вод Судогодского водозабора в д. Жуковка Судогодского района Владимирской области (по состоянию изученности на 01.06.2015) / В.С. Спорышев, С.А. Евграфов, С.О. Гриневский [и др.]. – Москва, 2015.
161. Отчет о результатах детальной разведки подземных вод на Южно-Воронежском участке для хозяйственно-питьевого водоснабжения г. Воронежа (подсчет запасов по состоянию на 01.08.1981 г.) / В.Н. Шульженко, В.И. Харченко, Н.Г. Соколов [и др.]. – Придонская ГРЭ ПГО «Центргеология». – Воронеж, 1981.

Приложение 1. Разрезы по скважинам на участке ВПС-4 г. Воронежа

Геологический разрез по скважине 31н (10рэ)

Масштаб	Геологический возраст	Номер слоя	Описание пород	Геологический разрез и конструкция скважины	Мощность слоя, м			Категории пород	Уровень воды, м		Крепл. скв., мм		Абс. отметка подошвы слоя, м
					От	До	Пог. метров		Появление	Установлен.	Диаметр, мм	Глубина, м	
2	th _{IV}	1	Песок намывной	1020	0.0	3.5	3.5	2					
4		2	Иловые отложения	426	3.5	4.5	1	3					
6			Суглинки	5					6.25	6.25	1020	5	
8		3			4.5	8.5	4.0	3					
10		4	Песок мелкозернистый водонасыщенный	820	8.5	11.5	3.0	2					
12		5	Глины темно-серые		11.5	13.5	2.0	3					
14				14									
16			Песок разнозернистый с 6,5м водонасыщенный с включениями гравия и гальки, в основании валуны.								820	17	
18	al _{IV}	6		720									
20				630									
22				400									
24				21									
26				25									
26	N ₂ kr	7	Глина серая, плот. Песок среднезернистый водонасыщенный с включением гравия и гальки.	25.5	13.5	26	12.5	2			720	27	
28		8		27	26	26.5	0.5	3					
30					26.5	30	3.5	2					
32	N ₂ bg												
34													
36		9	Песок мелкозернистый водонасыщенный										
38													
40	D ₃ sm	10	Глина плотная, темно-серая	39.45	30	39.5	9.5	2			630	40.3	
				40.3	39.5	40.3	0.8	3			400	40.3	

Геологический разрез по скважине 4н.

Масштаб	Геологический возраст	Номер слоя	Описание пород	Геологический разрез и конструкция скважины	Мощность слоя, м			Категории пород	Уровень воды, м		Крепл. скв., мм		Абс. отметка подошвы слоя, м
					От	До	Пог. метров		Появление	Установлен.	Диаметр, мм	Глубина, м	
2	th _{IV}	1		114									
4				219	0.0	4.5	4.5	2					
6			Иловые отложения		4.5	6.0	1.5	1					
8		2	Глина серая плотная, темно-серая		6.0	9.5	3.5	3					
10													
12	al _{IV}		Песок разнозернистый, серый водонасыщенный.	168	9.5	12.5	3.0	2					
14			Глина серая плотная, темно-серая		12.5	14.5	2	3			219	13.5	
16		3	Песок разнозернистый, серый водонасыщенный.										
18			Песок		14.5	17.5	3	2					
20		4	разнозернистый, желтовато-серый водонасыщенный.		17.5	20.5	3	2					
22													
24													
26													
28	N ₃ bg	5	Песок среднезернистый водонасыщенный с включением гравия и гальки.										
30													
32													
34													
36													
38		6	Песок мелкозернистый водонасыщенный		20.5	37.5	17	2					
40	D ₃ sm	7	Глина плотная, темно-серая	41	37.5	40.5	3	2					
				41.5	40.5	41.5	1	3			114	41.5	

Приложение 2. Практическая реализация совместной калибровки

Численная модель представляет собой набор данных, описывающий выбранную геофильтрационную схему. В Modflow данные разделены на несколько частей, которые называются модулями или «пакетами» (packages). Каждому модулю соответствует отдельный файл. Таким образом, модель для Modflow представляет собой набор текстовых файлов. Количество и тип используемых файлов зависит от того, какую геофильтрационную схему необходимо воспроизвести в численной модели.

Сама программа Modflow представляет собой консольное приложение, отвечающее за расчет напоров и расходов на заданной модельной сетке. Единственной функцией Modflow является чтение параметров модели, расчет напоров и расходов, и запись результатов. Для облегчения работы с Modflow разработаны специализированные оболочки, имеющие графический интерфейс, обеспечивающие как задание всех параметров модели, так и визуализацию результатов. Кроме того, в этих оболочках зачастую объединено несколько программ, дополняющих и расширяющих возможности Modflow. Этими дополнительными программами могут являться MT3DMS для решения задач геомиграции, PEST для выполнения калибровки модели, и прочие. Различные оболочки обладают различным набором функций, как и различным набором интегрированных вспомогательных программ. Однако, при всех своих различиях, главная функция оболочек одинакова – на основе введенных пользователем данных записать файлы, соответствующие модулям Modflow, запустить вычисления и считать результаты.

По этой причине в данном приложении больше внимания уделяется непосредственно текстовым файлам, требуемым для работы программ Modflow [96], MT3DMS [145] и PEST [73]. Все примеры и описания приведены для модели СХК, описанной в разделе 3.1. Эта модель была разработана с помощью оболочки Processing Modflow [65] версии 8 (PM8), что обусловило некоторые особенности использованных форматов файлов. Все названия типов файлов и модулей приведены в соответствии с руководством пользователя для соответствующих программ.

Кратко напомним геофильтрационную схематизацию рассматриваемой модели. Модельная сетка в плане представляет собой прямоугольник размером 3600×1300 м, разбитый на квадратные блоки со стороной 25 м. Разрез описывается 5 слоями. Учитывается вертикальная анизотропия, коэффициенты фильтрации в вертикальном и горизонтальном направлении различны. Поступление воды в модель происходит за счет инфильтрационного питания, выделено три зоны с различной интенсивностью. Кроме того, предполагается утечка воды из хранилищ промышленных отходов. Отток воды из модели осуществляется за счет ГУ

III рода, заданного на западной границе модели. Также идет разгрузка подземных вод в два водохранилища (см. рисунок 3.4).

Структура модели Modflow

Для модели Modflow основным файлом является так называемый NAME-файл, в котором указаны ссылки на все прочие файлы, составляющие модель, а также, на файлы, в которые требуется записать результаты. При запуске Modflow требуется указать название и расположение NAME-файла, остальные файлы считываются согласно указанным ссылкам. Название NAME-файла может быть произвольным, однако стандартным расширением является *.nam*. В модели СХК этот файл имеет название *ground-16.nam*, его содержимое приведено ниже на рисунке 1.

LIST	3	output.dat
DIS	105	discret.dat
BAS6	1	bas6.dat
ZONE	93	zone.dat
MULT	94	multiple.dat
LPF	31	lpf6.dat
PCG	23	pcg2.dat
GHB	17	ghb6.dat
RCH	18	rch6.dat
RIV	19	riv6.dat
LMT6	66	lmt6.dat
OC	22	oc.dat
DATA(BINARY)	50	budget.dat
DATA(BINARY)	51	heads.dat
DATA(BINARY)	52	ddown.dat

Рисунок 1. NAME-файл Modflow для модели СХК.

NAME-файл состоит из трех столбцов. В первом столбце приводится установленное обозначение типа файла, на который написана ссылка. Обозначение указывается строго в соответствии с руководством. Во втором столбце указывается внутренний номер, который в дальнейшем является кратким указателем на этот файл. Номер может быть указан произвольно, у каждого файла номер должен быть уникальным. В третьем столбце указывается название соответствующего файла, название может быть произвольным. В данном случае, поскольку все файлы расположены в одной папке, указаны только их названия. Папка, в которой расположен NAME-файл, считается текущей рабочей папкой модели. Допускается произвольное расположение файлов, в этом случае требуется указать полный или относительный путь к файлу, который не расположен в рабочей папке модели.

Приведенный файл был записан оболочкой Processing Modflow 8, этот вариант не является единственно возможным для описываемой модели. В данном NAME-файле использованы следующие обозначения:

- *LIST* – файл, в который записывается отчет о работе Modflow;

- *DIS* – файл пространственной и временной дискретизации модели. В нем указаны размеры модельной сетки в плане, положение всех границ слоев, и список временных шагов;
- *BAS6* – базовое описание модели. В нем указаны активные и неактивные области модели и значения начальных уровней, с которых начинаются вычисления;
- *ZONE* – файл, в котором указывается деление модельной сетки на зоны;
- *MULT* – файл множителей. Используется для задания параметров по зонам;
- *LPF* – файл, содержащий коэффициенты фильтрации и емкостные параметры;
- *PCG* – файл с настройками солвера PCG;
- *GHB* – файл с описанием модуля General-Head Boundary;
- *RCH* – файл с описанием модуля Recharge;
- *RIV* – файл с описанием модуля River;
- *LMT6* – файл настроек записи информации, необходимой в дальнейшем для работы программы MT3DMS. В данном примере для записи указан файл *MT3D.flo*;
- *OC* – файл настроек сохранения результатов. Указывается, на каких временных шагах и какие именно данные записывать в файлы результатов.
- *DATA(BINARY)* – указывает бинарные файлы для сохранения результатов. В данном случае указаны три ссылки, для сохранения уровней (*heads.dat*), расходов (*budget.dat*) и понижений (*dtdown.dat*).

Структура модели MT3DMS

Структура модели для программы MT3DMS аналогична Modflow. Модель состоит из набора файлов, содержащих описание модели. Список используемых файлов приводится в NAME-файле. Аналогично, названия используемых файлов могут быть произвольными. При запуске MT3DMS требуется указать название и расположение NAME-файла, остальные файлы считываются согласно указанным ссылкам. NAME-файл для миграции модели СХК называется *ground-16.mtn*, его содержимое приведено ниже на рисунке 2.

LIST	0	OUTPUT.MTM
BTN	0	mtmsbtn1.dat
FTL	0	mt3d.flo
ADV	0	mtmsadv1.dat
DSP	0	mtmsdsp1.dat
SSM	0	mtmssm1.dat
GCG	0	mtmsgcg1.dat

Рисунок 2. NAME-файл MT3DMS для модели СХК.

- LIST – файл, в который записывается отчет о работе MT3DMS;
- BTN – файл, в котором содержится базовое описание геомиграционной модели. Он включает в себя описание размеров расчетной сетки, эффективную пористость, активные и неактивные области модели, начальные концентрации и временную дискретизацию;
- FTL – файл, содержащий информацию о расходах подземных вод по блокам и граничным условиям. В этот файл Modflow записывает результаты решения геофильтрационной задачи при использовании модуля LMT6;
- ADV – файл, содержащий общие настройки решения задачи геомиграции;
- DSP – файл, содержащий параметры дисперсии;
- SSM – файл, содержащий описание источников и стоков вещества в модели;
- GCG – файл, содержащий настройки солвера GCG.
- Кроме того, результаты расчетов сохраняются в файлы, которые не указываются в NAME-файле. Стандартным названием является MT3D%N%.ucn, где N – порядковый номер моделируемого мигранта.

Принцип работы PEST.

PEST – это программа, предназначенная для калибровки моделей. Она разработана независимо от остальных программ, автор – John Doherty. Важная особенность PEST состоит в том, что она универсальна, и не связана с какой-либо конкретной программой для моделирования. Это обусловило использованный автором подход к реализации алгоритма, блок-схема которого показана на рисунке 2.2. Общий порядок действий таков:

1. PEST обновляет входные файлы модели;
2. PEST запускает требуемые модели;
3. PEST считывает результаты моделирования и вычисляет целевую функцию. При необходимости обновляет значения параметров и возвращается к пункту 1.

В распространенных графических оболочках, объединяющих программы Modflow, MT3DMS и PEST, отсутствует поддержка калибровки геомиграционных параметров. С помощью оболочки можно сформировать только набор файлов, обеспечивающий калибровку геофильтрационной модели. В текущем разделе приведено описание файлов, сформированных оболочкой Processing Modflow 8. Изменения, требуемые для реализации совместной калибровки геофильтрационной и геомиграционной моделей указаны в следующем разделе.

Работа с входными файлами модели

PEST осуществляет изменение модельных параметров путем прямого редактирования файлов модели, и вычисляет целевую функцию на основе значений, считанных из файла результатов. Таким образом, для совмещения PEST с программами для моделирования необходимо, чтобы перед выполнением расчета модельные параметры считывались из текстового файла известного формата. Также необходимо, чтобы результаты моделирования сохранялись в виде текстового файла известного формата. Для реализации этого требования могут быть использованы дополнительные пре- и пост-процессоры.

Как указано в разделе 3.1.4, для калибровки в модели СХК были выбраны коэффициенты фильтрации, инфильтрационное питание и эффективная пористость. В описываемой модели, коэффициенты фильтрации и величины инфильтрационного питания хранятся в файле множителей *multiple.dat*. (По умолчанию, коэффициенты фильтрации записываются в файл *LPF*, инфильтрационное питание – в файл *RCH*). Эффективная пористость хранится в файле *mtmsbtn1.dat*. Для проведения калибровки требуется изменять только два указанных файла с параметрами. Прочие модельные файлы изменять не требуется. Для редактирования файлов с параметрами PEST использует специальные файлы-шаблоны (*template file*). Фрагмент шаблона для файла *multiple.dat* приведен ниже на рисунке 3. Шаблон, как и прочие файлы, сформирован оболочкой Processing Modflow 8.

Шаблон повторяет файл параметров с некоторыми изменениями. В самом начале, после кодового обозначения *ptf* (сокращение от *PEST template file*) объявлен служебный символ, в данном случае – восклицательный знак. Можно использовать любой символ из кодировки ASCII, кроме букв и цифр. Этот символ не должен встречаться в основном файле, иначе это приведет к возникновению ошибок.

Служебным символом в шаблоне обозначены места замен. Между двумя служебными символами вставлено обозначение параметра. Например, *НК_1* обозначает горизонтальный коэффициент фильтрации первого слоя, который указан в качестве калибруемого параметра в разделе 3.1.4. При переносе данных из шаблона в рабочий файл модели вместо обозначения подставляется значение соответствующего параметра. Необходимо иметь в виду, что количество цифр в числе после подстановки равно количеству символов в обозначении параметра, включая пробелы и два служебных символа. В некоторых форматах записи файлов необходимо строго соблюдать ширину полей для записи параметров. В приведенном примере формат записи инфильтрационного питания обозначен как *5G14.0*. Это означает, что значения питания записаны в пять колонок шириной по 14 символов, без ограничений на количество знаков после точки. Строки без служебных символов переносятся из шаблона в рабочий файл

как есть. Формат файла шаблона должен строго соответствовать требуемому формату рабочего файла модели, как показано в примере на рисунке 3.

Каждую итерацию калибровки PEST обновляет рабочие файлы модели в соответствии с шаблоном, подставляя каждый раз новые значения на места цифробуквенных обозначений параметров. После чего запускаются программы, выполняющие собственно геофильтрационные и геомиграционные расчеты.

Фрагмент шаблона <i>multiple.tpl</i>	Фрагмент файла <i>multiple.dat</i>
ptf !	
# Multiplier file for MODFLOW	# Multiplier file for MODFLOW
11	11
HK1	HK1
Constant !HK_1! HK1	Constant .050000 HK1
HK2	HK2
Constant .2 HK2	Constant .2 HK2
HK3	HK3
Constant !HK_3! HK3	Constant 3.50000 HK3
HK4	HK4
Constant !HK_3! HK4	Constant 3.50000 HK4
HK5	HK5
Constant .2 HK5	Constant .2 HK5
VK1	VK1
Constant .1 VK1	Constant .1 VK1
VK2	VK2
Constant !VK_2! VK2	Constant .007300 VK2
VK3	VK3
Constant !VK_3! VK3	Constant .1 VK3
VK4	VK4
Constant !VK_3! VK4	Constant .1 VK4
VK5	VK5
Constant .0073 VK5	Constant .0073 VK5
RCH_1	RCH_1
94 1(5G14.0) -1 RECHARGE period 1	94 1(5G14.0) -1 RECHARGE period 1
!RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! !RCH_L!	.000400 .000400 .000400 .000400 .000400
!RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! !RCH_L!	.000400 .000400 .000400 .000400 .000400
!RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! !RCH_L!	.000400 .000400 .000400 .000400 .000400
!RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! !RCH_L!	.000400 .000400 .000400 .000400 .000400
!RCH_L! !RCH_L! !RCH_L! 0 0	.000400 .000400 .000400 0 0
0 0 0 0 0	0 0 0 0 0
0 0 0 0 0	0 0 0 0 0
0 0 0 0 0	0 0 0 0 0
...	...

Рисунок 3. Сравнение шаблона *multiple.tpl* с рабочим файлом модели *multiple.dat*. Серым цветом обозначены места замен.

Запуск моделей при работе PEST и чтение результатов

Запуск моделей осуществляется с помощью BATCH-файлов, стандартных для операционных систем разработки Microsoft. Они имеют стандартное расширение *.bat*. В BATCH-файле по порядку указываются команды, обычно – запуск требуемых программ. Modflow записывает результаты расчетов в виде набора матриц, которые PEST не может

использовать напрямую. Требуется из набора матриц извлечь по требуемым координатам и временным шагам извлечь отдельные значения, которые уже можно сравнивать с фактическими замерами (уровней или расходов в случае Modflow). Для извлечения требуемых значений к Processing Modflow 8 прилагается вспомогательная программа (постпроцессор), которая имеет название *modbore.exe*. Таким образом, при калибровке модели Modflow с помощью PEST «запуск модели» на рисунке 2.2 на самом деле подразумевает запуск двух программ. Для этого Processing Modflow 8 создает файл *modelrun.bat*, в котором и указано, что сначала надо запустить Modflow для расчета модели с NAME-файлом *ground-16.nam*, после чего запустить *modbore.exe* для экспорта отдельных замеров (рисунок 4). Файл *modbore.dat* содержит параметры, необходимые для выполнения экспорта и также создается Processing Modflow 8.

```
%путь установки РМ8%\modflow2005\mf2005.exe ground-16.nam
%путь установки РМ8%\pest\modbore.exe < modbore.dat
```

Рисунок 4. Содержимое файла *modelrun.bat*.

Программа Modbore разработана специально как дополнение к PEST. В соответствии с указанными параметрами она считывает файл результатов *heads.dat* и записывает в файл *heads.out* расчетные уровни по указанным координатам в виде списка. В PEST не заложено какого-либо стандартного формата считываемых файлов, поэтому требуется специальный файл инструкций, в котором описан формат файла *heads.out*. Как и все прочие файлы, в данном случае файл инструкций *heads.ins* создан автоматически оболочкой Processing Modflow 8. За полным описанием правил составления файлов инструкций следует обратиться к руководству по PEST [73]. Фрагмент файла инструкций показан на рисунке 5, использованная запись означает следующее:

- В заголовке, аналогично файлам-шаблонам, указывается кодовое обозначение *pif* (сокращение от *PEST instruction file*) и служебный символ, в данном случае «#»;
- Служебными символами обозначено слово, которое требуется найти. В данном случае – SIMULATION, которое записано до начала списка уровней. Поиск останавливается на первом встреченном слове;
- В следующей записи «*l1*» означает, что после найденного на предыдущем шаге слова необходимо перейти на одну строку (*line*) вниз. И в этой строке между позициями 48 и 65 записано число, соответствующее замеру под названием P-1. Это соответствует известному формату *heads.out*, который записан вспомогательной программой *modbore.exe*. В этом формате столбцы текстовой таблицы разделены пробелами и каждому параметру отведено строго заданное положение в строке.

Фрагмент файла результатов <i>heads.out</i>	Фрагмент файла инструкций <i>heads.ins</i>
INTERPOLATED HEAD ARRAY FOR TIME STEP 1 OF STRESS PERIOD 1 -----> ELAPSED TIME SINCE START OF STRESS PERIOD = 1.00000	pif # #SIMULATION#
ELAPSED TIME SINCE START OF SIMULATION = 1.00000	I1 [P-1]48:65
P-1 11410 12385 124.60	I1 [P-2]48:65
P-2 11485 12510 125.77	I1 [P-3]48:65
P-3 11410 12485 124.36	I1 [P-4]48:65
P-4 11285 12410 123.54	I1 [P-5]48:65
P-5 11260 12335 123.61	I1 [P-6]48:65
P-6 11185 12360 122.61	I1 [P-7]48:65
P-7 11210 12485 123.02	I1 [P-8]48:65
P-8 11260 12610 123.93	I1 [P-10]48:65
P-10 10485 12810 115.62	I1 [P-11]48:65
P-11 10810 12910 119.24	...
...	

Рисунок 5. Фрагмент файла результатов *heads.out* и соответствующего ему файла инструкций *heads.ins*

Очевидно, что при реализованном в PEST подходе постпроцессор должен обеспечивать сохранение порядка записи замеров при каждом перезапуске, поскольку инструкция указывает строго определенный адрес каждого замера в файле результатов.

Файл настроек PEST

Обобщая написанное выше, практическая реализация одной итерации калибровки состоит из следующих шагов:

1. PEST переписывает файл *multiple.dat* на основе *multiple.tpl* с обновленными значениями параметров
2. PEST запускает файл *modelrun.bat*, в котором прописаны ссылки на исполняемые файлы Modflow и Modbore.
3. PEST считывает расчетные уровни из файла *heads.out* используя файл *heads.ins* и рассчитывает целевую функцию.
4. При необходимости PEST изменяет значения параметров и возвращается на шаг 1.

Все настройки, необходимые для работы PEST, указываются в специальном файле настроек. Как и у всех прочих файлов, название может быть произвольным, рекомендуется расширение *.pst*. Стандартным названием файла настроек PEST, который записывает оболочка Processing Modflow 8, является *pestctl.pst*. Содержимое файла *pestctl.pst* для модели СХК приведено на рисунке 6. Структура файла настроек PEST является строго заданной, за подробностями следует обратиться к руководству [73].

```

pcf
* control data
norestart estimation
7 26 2 0 1
1 1 single nopoint
10 2 .3 .01 8
10 10 .001
.1
0 .01 3 3 .01 3
1 1 1
* parameter groups
Kf          relative .01 0 always_2 1 parabolic
Recharge    relative .01 0 always_2 1 parabolic
* parameter data
HK_1  log factor .2      .01      1      Kf      1      0
HK_3  log factor .2      1        10     Kf      1      0
VK_2  log factor .1      0.001   .1     Kf      1      0
VK_3  log factor .1      0.05    1      Kf      1      0
RCH_L log factor 5.2E-4 1E-4    1E-3   Recharge 1      0
RCH_R log factor 5.2E-4 1E-4    1E-3   Recharge 1      0
RCH_H log factor 6E-3   1E-3    1E-2   Recharge 1      0
* observation groups
DEFAULT
* observation data
P-1    124.60  1  DEFAULT
P-2    125.77  1  DEFAULT
P-3    124.36  1  DEFAULT
P-4    123.54  1  DEFAULT
P-5    123.61  1  DEFAULT
P-6    122.61  1  DEFAULT
P-7    123.02  1  DEFAULT
P-8    123.93  1  DEFAULT
P-10   115.62  1  DEFAULT
P-11   119.24  1  DEFAULT
P-13   115.34  1  DEFAULT
P-15   116.21  1  DEFAULT
P-17   116.14  1  DEFAULT
P-18   119.83  1  DEFAULT
P-151  115.97  1  DEFAULT
P-1b   119.99  1  DEFAULT
P-2b   118.20  1  DEFAULT
P-3b   117.00  1  DEFAULT
P-7b   116.27  1  DEFAULT
E-122  115.25  1  DEFAULT
E-124  113.61  1  DEFAULT
E-126  110.58  1  DEFAULT
E-127  117.23  1  DEFAULT
E-128  117.10  1  DEFAULT
E-142  120.58  1  DEFAULT
E-144  121.60  1  DEFAULT
* model command line
modelrun.bat
* model input/output
multiple.tpl  multiple.dat
heads.ins     heads.out
* prior information

```

Рисунок 6. Файл настроек PEST *pestctl.pst*.

Файл настроек PEST обязательно начинается с кодового обозначения *pcf* (*PEST control file*). Сам файл разделен на несколько секций, каждая секция имеет строго определенное обозначение, начинающееся с символа «*».

– Секция **control data* содержит общие настройки процесса калибровки, такие как количество разрешенных итераций и критерий завершения калибровки. Большая часть параметров может быть оставлена без изменений, в используемых графических оболочках для Modflow по умолчанию используются значения, подходящие для большинства задач. Следует обратить внимание на строки №4 и №5. В строке №4 первым и вторым параметрами указано количество параметров и количество замеров соответственно. В строке №5 первым параметром указано количество используемых файлов шаблонов, вторым параметром указано количество используемых файлов инструкций. Расположение этих параметров выделено серым цветом. В строке №4 на третьей и пятой позиции указано количество групп параметров и наблюдений. На четвертой позиции указано количество записей априорной информации.

– Секция **parameter groups* содержит список групп модельных параметров и общие настройки их подбора.

– Секция **parameter data* содержит список параметров, настройки их подбора, включая начальные, минимальные и максимальные значения.

– Секция **observation groups* содержит список названий групп наблюдений. В данном примере существует единственная группа с принятым по умолчанию названием DEFAULT.

– Секция **observation data* содержит список используемых наблюдений. В каждом пункте списка на первой позиции записывается уникальное обозначение каждого наблюдения. На второй позиции – его величина. На третьей позиции записывается весовой коэффициент. На четвертой позиции записывается название группы, к которой относится данное наблюдение. Пока указаны только замеры уровней, все весовые коэффициенты равны единице.

– Секция **model command line* содержит ссылку на исполняемый файл, который запускает модель. В данном примере – *modelrun.bat*, описанный выше.

– Секция **model input/output* содержит ссылки на файлы, с которыми взаимодействует PEST. Шаблоны, соответствующие им входные файлы модели, инструкции и соответствующие им файлы результатов. В данном примере – *multiple.tpl*, *multiple.dat*, *heads.ins* и *heads.out*. То, что ссылка состоит только из названия файла, означает, что все указанные файлы расположены в одной рабочей папке. В ином случае необходимо указать полный или относительный путь к файлу.

– Секция **prior information* содержит априорную информацию, отсутствующую в рассматриваемом примере.

Совмещение моделей геофильтрации и геомиграции

Для реализации совместной калибровки двух моделей необходимо внести некоторые изменения в файлы, подготовленные с помощью оболочки Processing Modflow 8. А именно:

1. Добавить эффективную пористость к калибруемым параметрам;
2. Добавить запуск геомиграционной модели после завершения расчета геофильтрационной;
3. Обеспечить извлечение расчетных концентраций в требуемых точках и временных шагах из общего файла результатов;
4. Добавить замеры концентраций в целевую функцию.

Калибровка геомиграционных параметров не поддерживается современными оболочками. Соответственно, не предусмотрена генерация файлов-шаблонов для модулей, используемых MT3DMS. Для добавления эффективной пористости к калибруемым параметрам необходимо, в первую очередь, составить файл-шаблон для BTN-файла MT3DMS. Если назвать параметр эффективной пористости как POR, то шаблон будет выглядеть как показано на рисунке 7, имея в виду, что по выбранной схеме пористость одинаковая для всей модели.

Фрагмент шаблона <i>mtmsbtn1.tpl</i>	Фрагмент файла <i>mtmsbtn1.dat</i>
ptf !	5 53 145 1 1 1
5 53 145 1 1 1	T L M
T L M	T T T F T
T T T F T	1 0 0 0 0
1 0 0 0 0	0 25 -1 A7. DELR(NCOL)
0 25 -1 A7. DELR(NCOL)	0 25 -1 A8. DELC(NROW)
0 25 -1 A8. DELC(NROW)	100 1(5G14.0) -1 A9; Top of the first layer
100 1(5G14.0) -1 A9; Top of the first layer	90.44 91.14 92.32 93.41 93.13
90.44 91.14 92.32 93.41 93.13	...
...	...
...	0 .2500 -1 A11. Effective porosity of layer 1
0 !POR! -1 A11. Effective porosity of layer 1	0 .2500 -1 A11. Effective porosity of layer 2
0 !POR! -1 A11. Effective porosity of layer 2	0 .2500 -1 A11. Effective porosity of layer 3
0 !POR! -1 A11. Effective porosity of layer 3	0 .2500 -1 A11. Effective porosity of layer 4
0 !POR! -1 A11. Effective porosity of layer 4	0 .2500 -1 A11. Effective porosity of layer 5
0 !POR! -1 A11. Effective porosity of layer 5	0 1 -1 A12. ICBUND matrix of Layer 1
0 1 -1 A12. ICBUND matrix of Layer 1	...
...	...

Рисунок 7. Фрагмент файла-шаблона для модуля BNT *mtmsbtn1.dat*.

Кроме того, необходимо внести соответствующие изменения в файл настроек PEST *pestctl.pst*, а именно:

- Увеличить количество объявленных параметров до 8
- Увеличить количество объявленных шаблонов до 2
- При желании добавить группу параметров пористости и увеличить количество объявленных групп параметров до 3. Без изменения групповых настроек добавление еще одной группы не требуется.
- Добавить PAR в список параметров.
- Вписать *mtmsbtn1.tpl* и *mtmsbtn1.dat* в секцию **model input/output*.

Для запуска геомиграционной модели и извлечения результатов необходимо отредактировать уже используемый BATCH-файл *modelrun.bat*. К уже прописанным двум командам (рисунок 4) необходимо добавить команду на запуск MT3DMS и команду на запуск вспомогательной программы, отвечающей за извлечение результатов (рисунок 8). Для упрощения работы и избежания технических ошибок рекомендуется все используемые исполняемые файлы скопировать в общую рабочую папку. За счет этого можно использовать сокращенные ссылки (только название файла, без пути). Это обеспечивает переносимость модели между компьютерами, поскольку в текстовых файлах ссылки не изменяются автоматически, и на разных компьютерах требуемые исполняемые файлы могут быть расположены в разных папках. Стандартным исполняемым файлом MT3DMS является *mt3dms.exe*, который в данном примере использует NAME-файл *ground-16.mtn*. Для извлечения концентраций из результатов расчета MT3DMS в комплектацию оболочки Processing Modflow 8 входит вспомогательная программа *mt3bore.exe*. В комплект вспомогательных программ современных версий PEST входит *mod2smp.exe*, которая поддерживает извлечение результатов из файлов как Modflow так и MT3DMS.

mf2005.exe	ground-16.nam
modbore.exe	< modbore.dat
mt3dms.exe	ground-16.mtn
mt3bore.exe	< mt3bore.dat

Рисунок 8. Дополненный файл *modelrun.bat*.

Последний шаг – добавление концентраций в целевую функцию. Как указано в разделе 3.1.4, всего использовано 754 значения концентраций. При работе с MT3DMS особого внимания требуют настройки времени. Использование метода решения TVD, рекомендованного разработчиками для большинства геомиграционных задач [145], подразумевает переменный временной шаг расчета миграции. Количество расчетных шагов может достигать тысяч и десятков тысяч. По этой причине, результаты расчета сохраняются

только для заранее обозначенных моментов времени, которые указываются в конце файла BTN. Необходимо убедиться, что временные отметки сохранения результатов расчетов соответствуют временным отметкам используемых значений концентраций.

В описываемом примере используемые наблюдения – синтетические, и времена «замеров» концентраций мигранта во всех скважинах совпадают. На практике это трудно достижимо, и может потребоваться как приведение разновременных замеров к общему расписанию, так и приведение моментов сохранения результатов в соответствие с расписанием замеров.

В рассматриваемом примере продолжительность расчетного периода составляет 20 000 сут. Сохранение результатов расчетов выполняется каждый год. Точнее, временные моменты сохранения результатов кратны 365.25 сут от начала расчетного периода (0, 365.25, 730.5, и т.д.), кроме последнего момента (20 000 сут). В качестве «замеров» использованы не все расчетные концентрации. Исключены все незначительные (менее 0.0001) концентрации, рассчитанные в наблюдательных скважинах до прихода фронта загрязнения. Таким образом, в разных скважинах первый замер может иметь разную временную отметку. Например, в скважине P-8 (таблица 3.5) первый замер сохранен уже на момент времени 365.25 сут. А в скважине E-122 первый замер сохранен на момент времени 6209.25 сут.

В качестве названия файла, в который записываются расчетные концентрации в заданных точках, выбрано *conc.out*. Для его обработки необходим файл инструкций, который назван *conc.ins*. Структура выходного файла *mt3bore.exe (conc.out)* полностью аналогична структуре выходного файла *modbore.exe (heads.out)*, приведенного выше (рисунок 5). Данные по все скважинам сгруппированы по временам.

В отличие от геофильтрационной модели, модель геомиграции нестационарная. В файле *heads.out* записывается всего один временной шаг. В файле *conc.out*, при заданном расписании сохранения результатов, записывается 56 временных шагов, включая начальное распределение концентраций. Для поиска требуемых значений в файле используются ключевые слова. В файле *heads.ins*, сгенерированном оболочкой PM8, используется слово *SIMULATION*. Возможно использовать любое ключевое слово (набор символов), которые позволяют идентифицировать временной шаг и позицию внутри файла. Например, можно использовать временные метки, как показано на рисунке 9. Ключевые слова сравниваются посимвольно, поэтому важно соблюдать порядок и количество любых символов, в том числе пробелов и знаков табуляции. Также следует помнить, что изменение расписания сохранения результатов потребует изменения временных меток. На рисунке 9 приведен фрагмент файла результатов *conc.out* и соответствующего ему файла инструкций *conc.ins*.

Фрагмент файла результатов <i>conc.out</i>	Фрагмент файла инструкций <i>conc.ins</i>
<pre> INTERPOLATED CONCENTRATION ARRAY FOR TRANSPORT STEP 1 -----> (TIME STEP 1 OF STRESS PERIOD 1) ELAPSED TIME SINCE START OF SIMULATION = 0.00000 ... ELAPSED TIME SINCE START OF SIMULATION = 365.250 E-122 10460.000 12535.000 0.000000 E-124 10310.000 12535.000 0.000000 E-126 10085.000 12860.000 0.000000 E-127 10635.000 12935.000 0.000000 E-144 11060.000 12510.000 0.000000 P-10 10485.000 12810.000 0.000000 P-11 10810.000 12910.000 0.000000 P-13 10460.000 12510.000 0.000000 P-15 10535.000 12360.000 0.000000 P-151 10510.000 12410.000 0.000000 P-18 10885.000 12335.000 0.000000 P-2 11485.000 12510.000 0.000000 P-3 11410.000 12485.000 0.000000 P-4 11285.000 12410.000 0.000000 P-5 11260.000 12335.000 0.000000 P-6 11185.000 12360.000 0.000000 P-7 11210.000 12485.000 0.000000 P-8 11260.000 12610.000 0.1712031E-01 ELAPSED TIME SINCE START OF SIMULATION = 730.500 ... ELAPSED TIME SINCE START OF SIMULATION = 1461.00 E-122 10460.000 12535.000 0.000000 E-124 10310.000 12535.000 0.000000 E-126 10085.000 12860.000 0.000000 E-127 10635.000 12935.000 0.000000 E-144 11060.000 12510.000 0.2268854E-06 P-10 10485.000 12810.000 0.000000 P-11 10810.000 12910.000 0.6092528E-26 P-13 10460.000 12510.000 0.000000 P-15 10535.000 12360.000 0.000000 P-151 10510.000 12410.000 0.000000 P-18 10885.000 12335.000 0.3103609E-24 P-2 11485.000 12510.000 -0.2224185E-06 P-3 11410.000 12485.000 0.4085740E-02 P-4 11285.000 12410.000 0.6795665E-09 P-5 11260.000 12335.000 -0.1803529E-17 P-6 11185.000 12360.000 0.5584514E-15 P-7 11210.000 12485.000 0.1654076E-03 P-8 11260.000 12610.000 0.9718729 ... </pre>	<pre> pif # #= 365# I18 [P-8_365]48:65 #= 730# I18 [P-8_730]48:65 #= 1095# I18 [P-8_1095]48:65 #= 1461# I13 [P-3_1461]48:65 I4 [P-7_1461]48:65 I1 [P-8_1461]48:65 #= 20000# I1 [E-122_20000]48:65 I1 [E-124_20000]48:65 I1 [E-126_20000]48:65 I1 [E-127_20000]48:65 I1 [E-144_20000]48:65 I1 [P-10_20000]48:65 I1 [P-11_20000]48:65 I1 [P-13_20000]48:65 I1 [P-15_20000]48:65 I1 [P-151_20000]48:65 I1 [P-18_20000]48:65 I1 [P-2_20000]48:65 I1 [P-3_20000]48:65 I1 [P-4_20000]48:65 I1 [P-5_20000]48:65 I1 [P-6_20000]48:65 I1 [P-7_20000]48:65 I1 [P-8_20000]48:65 </pre>

Рисунок 9. Фрагмент файла результатов *conc.out* и соответствующего ему файла инструкций *conc.ins*.

PEST осуществляет чтение файла результатов строго от первого символа к последнему. Указатель позиции чтения перемещается только вперед. По этой причине порядок наблюдений в файле инструкций должен соответствовать порядку записи файла результатов. При составлении файла инструкций необходимо внимательно отслеживать задаваемые смещения, чтобы указание на позицию чтения соответствовало искомому замеру.

Например, первые три года замеры указаны только для скважины Р-8. После строки заголовка, в которой прописано время, необходимо спуститься на 18 строк вниз (запись «118»), именно эта строка соответствует скважине Р-8. На четвертый год замеры записаны уже для трех скважин, и запись меняется. После строки, найденной поиском, необходимо спуститься вниз на 13 строк, чтобы перейти к записи скважины Р-3. Далее, необходимо спуститься вниз на 4 строки, чтобы перейти к записи скважины Р-7. И далее спуститься на 1 строку, чтобы перейти к записи скважины Р-8.

Позиция значений в строке строго определена (*другие вспомогательные программы/постпроцессоры могут использовать другой формат своих выходных файлов!*). Число, соответствующее расчетной концентрации (включая знак), записывается в пределах от 50 до 65 символа строки. Указание позиции 48:65 несколько шире, при считывании числа пробелы и знаки табуляции отбрасываются. Предполагается, что в указываемых пределах может находиться только одно число. Используемые файлы результатов и инструкций необходимо указать в файле настроек PEST в секции **model input/output*, и увеличить объявленное количество файлов инструкций до 2.

Последней важной составляющей является обозначение замеров. Каждый замер должен иметь уникальное название, позволяющее его однозначно идентифицировать. Название может быть произвольным. Оболочка PM8 при генерации файлов PEST использует сквозную нумерацию всех введенных замеров и самостоятельно отслеживает соответствие всех позиций. При работе с файлами напрямую нумерация замеров вида «1,2,3» неудобна. В данном примере в качестве названия замера используется обозначение скважины (для уровней) с добавлением времени замера (для концентраций). Название замера Р-8_1461 означает, что это концентрация, замеренная в скважине Р-8 в момент времени, соответствующий 1461 суткам расчетного периода.

Все указанные в файле инструкций замеры должны быть также указаны в файле настроек PEST в секции **observation data*. При этом необходимо увеличить объявленное количество наблюдений. Используется 754 замера концентраций и 26 замеров уровней, всего 780 замеров. После объединения замеров двух типов необходимо указать каждому замеру корректный

весовой коэффициент. Весовые коэффициенты приведены в разделе 3.1.4 и составляют для уровней $\omega_H = 1.45 \times 10^5 \text{ м}^2$, и для концентраций $\omega_C = 5.2 \times 10^5 \text{ д.е.}$

После внесения всех описанных выше дополнений и изменений (см. рисунок 10) можно выполнить автоматизированную калибровку совместно моделей геофильтрации и геомиграции.

<pre> pcf * control data norestart estimation 7 26 2 0 1 1 1 single nopoint 10 2 .3 .01 8 10 10 .001 .1 0 .01 3 3 .01 3 1 1 1 * parameter groups Kf relative .01 0 always_2 1 parabolic Recharge relative .01 0 always_2 1 parabolic * parameter data HK_1 log factor .2 .01 1 Kf 1 0 HK_3 log factor .2 1 10 Kf 1 0 VK_2 log factor .1 0.001 .1 Kf 1 0 VK_3 log factor .1 0.05 1 Kf 1 0 RCH_L log factor 5.2E-4 1E-4 1E-3 Recharge 1 0 RCH_R log factor 5.2E-4 1E-4 1E-3 Recharge 1 0 RCH_H log factor 6E-3 1E-3 1E-2 Recharge 1 0 * observation groups DEFAULT * observation data P-1 124.60 1 DEFAULT P-2 125.77 1 DEFAULT ... E-142 120.58 1 DEFAULT E-144 121.60 1 DEFAULT * model command line modelrun.bat * model input/output multiple.tpl multiple.dat heads.ins heads.out * prior information </pre>	<pre> pcf * control data norestart estimation 8 780 2 0 1 2 2 single nopoint 10 2 .3 .01 8 10 10 .001 .1 0 .01 3 3 .01 3 1 1 1 * parameter groups Kf relative .01 0 always_2 1 parabolic Recharge relative .01 0 always_2 1 parabolic * parameter data HK_1 log factor .2 .01 1 Kf 1 0 HK_3 log factor .2 1 10 Kf 1 0 VK_2 log factor .1 0.001 .1 Kf 1 0 VK_3 log factor .1 0.05 1 Kf 1 0 RCH_L log factor 5.2E-4 1E-4 1E-3 Recharge 1 0 RCH_R log factor 5.2E-4 1E-4 1E-3 Recharge 1 0 RCH_H log factor 6E-3 1E-3 1E-2 Recharge 1 0 POR none factor .3 .1 .35 Kf 1 0 * observation groups DEFAULT * observation data P-1 124.60 1.45E+05 DEFAULT P-2 125.77 1.45E+05 DEFAULT P-5_20000 0.2976 5.2E+05 DEFAULT P-6_20000 0.4643 5.2E+05 DEFAULT P-7_20000 0.8585 5.2E+05 DEFAULT P-8_20000 0.9881 5.2E+05 DEFAULT * model command line modelrun.bat * model input/output multiple.tpl multiple.dat mtmsbtn1.tpl mtmsbtn1.tpl heads.ins heads.out conc.ins conc.out * prior information </pre>
--	--

Рисунок 10. Файл настроек PEST *pestctl.pst* с описанными дополнениями.