

МІНІСТЕРСТВО ОСВІТИ І НАУКИ,
МОЛОДІ ТА СПОРТУ УКРАЇНИ
ДЕРЖАВНИЙ ВИЩИЙ НАВЧАЛЬНИЙ ЗАКЛАД
«НАЦІОНАЛЬНИЙ ГІРНИЧИЙ УНІВЕРСИТЕТ»



Д.В. Рудаков

**МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ
В ОХОРОНІ ПІДЗЕМНИХ ВОД**

Навчальний посібник

Дніпропетровськ
НГУ
2012

УДК 556.3.01
ББК 38.61.03
Р83

Рекомендовано до друку
редакційною радою Державного вищого навчального закладу
«Національний гірничий університет» як навчальний посібник для
студентів вищих навчальних закладів спеціальності 8.04030102
Гідрогеологія (протокол № 4 від 03.04.2012)

Рецензенти:

Г.П. Євграшкіна, д-р геол. наук, професор, завідувач кафедри
гідрометеорології і геоєкології (Дніпропетровський національний
університет ім. Олеся Гончара);

А.Я. Бомба, д-р техн. наук, професор, професор кафедри
інформатики та прикладної математики (Рівненський державний
гуманітарний університет).

Рудаков, Д.В.

Р83 Математичні методи в охороні підземних вод [Текст]:
навч. посібник / Д.В. Рудаков. – Д.: Національний гірничий
університет, 2012. – 158 с.

Викладено фізико-математичні основи методів, що використовуються у гідрогеоєкології, зокрема, аналітичних і чисельних методів моделювання на основі теорії гідродинамічної дисперсії і конвективного переносу в підземних водах, а також статистичних методів обробки експериментальних даних. Охарактеризовано сучасні методи охорони підземних вод. Включено інструкції до лабораторних робіт, які дозволяють краще засвоїти принципи моделювання міграції у підземних водах.

Для студентів геологічних спеціальностей, які навчаються на старших курсах.

УДК 556.3.01
ББК 38.61.03

© Д.В. Рудаков, 2012

© Державний ВНЗ «НГУ», 2012

ЗМІСТ

Передмова.....	4
Перелік основних позначень.....	6
Розділ 1. ОСНОВИ ТЕОРІЇ МАСОПЕРЕНОСУ В ПІДЗЕМНИХ ВОДАХ	8
1.1. Фізико-хімічні основи масопереносу в підземних водах.....	8
1.2. Рівняння масопереносу в підземних водах.....	14
1.3. Принципи геоміграційної схематизації.....	19
1.4. Особливості міграції в неоднорідних породних масивах.....	27
Розділ 2. МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ МАСОПЕРЕНОСУ В ПІДЗЕМНИХ ВОДАХ	34
2.1. Модель конвективного переносу вздовж лінії течії.....	34
2.2. Аналітичні залежності на основі моделі гідродинамічної дисперсії.....	55
2.3. Скінченнорізницева планова модель геоміграції.....	69
Розділ 3. СТАТИСТИЧНІ МЕТОДИ В ГІДРОГЕОЕКОЛОГІЇ.....	80
3.1. Основні поняття статистики.....	80
3.2. Перевірка статистичних гіпотез.....	89
3.3. Визначення зв'язків між експериментальними даними.....	99
3.4. Деякі практичні застосування статистичних методів у гідрогеоології.....	111
Розділ 4. ВИКОРИСТАННЯ МАТЕМАТИЧНИХ МЕТОДІВ ПРИ ОБҐРУНТУВАННІ ПРИРОДООХОРОННИХ ЗАХОДІВ.....	121
4.1. Методи захисту підземних вод від забруднення.....	121
4.2. Обґрунтування та оптимізація параметрів захисних заходів.....	132
Розділ 5. ЛАБОРАТОРНІ РОБОТИ.....	141
5.1. Вказівки до розрахунку міграції в програмі ModFlow.....	141
5.2. Чисельне моделювання міграції речовини у підземних водах до водозабору.....	143
5.3. Чисельне моделювання міграції речовини у підземних водах до водозабору в умовах його захисту.....	146
5.4. Визначення параметрів міграції на основі зворотного моделювання.....	149
5.5. Статистичний аналіз гідрогеоологічних і гідрохімічних даних.....	152
Список літератури.....	155
Предметний покажчик.....	157

ПЕРЕДМОВА

Погіршення якості підземних вод унаслідок техногенного впливу спонукало багато країн до розробки та впровадження низки програм з метою охорони та відновлення природного стану водних ресурсів. Важливим компонентом цих програм є наукове обґрунтування моніторингу, профілактичних та активних засобів захисту підземних вод, що базуються на сучасних гідрогеоекологічних дослідженнях. Впровадження заходів захисту протягом тривалого часу потребує надійних оцінок та достовірного прогнозу стану підземної гідросфери.

Гідрогеоекологічні дослідження проводяться як експериментальними, так і теоретичними методами. При цьому слід брати до уваги, що результати лабораторних досліджень міграції неможливо застосовувати в масштабі водоносного горизонту без певного корегування. До того ж породний масив є взагалі важкодоступним об'єктом, що досліджується лише через обмежену кількість контрольних точок. У таких умовах значно зростає роль математичних методів, які є менш витратними і на сучасному рівні дозволяють швидко порівнювати кілька сценаріїв міграції на природних об'єктах. Крім того, математичні методи є теоретичним підґрунтям моніторингу підземних вод і широко використовуються для інтерпретації його результатів.

Основою кількісного опису міграції речовин у підземних водах є математичні моделі масопереносу в пористих та тріщинуватих породах. Моделі мають враховувати неоднорідність породного масиву, часто порушеного внаслідок господарської діяльності, складний масообмін розчинів у порах з гірськими породами, а також фізико-хімічні перетворення забруднювачів. Багато чинників впливу на підземну міграцію речовин практично неможливо передбачити. Тому стало необхідним використовувати статистичні методи, які дозволяють визначати обґрунтованість результатів досліджень і висновків при обмеженій кількості експериментальних результатів.

Досвід розвинутих країн свідчить, що забруднення підземних вод є оборотним процесом. Застосування новітніх технологій очистки водоносних горизонтів від промислових забруднювачів дозволили на багатьох ділянках відновити природний стан підземних вод або

досягти значного прогресу в цьому напрямку. Використання цих технологій потребує від фахівця ґрунтовних знань з підземної гідродинаміки, гідрогеохімії та математичного моделювання. В умовах обмежених технічних і фінансових можливостей виникає задача оптимізації наявних ресурсів для раціонального впровадження заходів з охорони підземних вод.

Отже, майбутні фахівці з гідрогеоекології мають грамотно використовувати методи моделювання міграції у підземних водах. Це потребує вміння:

1) обґрунтовано обирати модель міграції відповідно до природних та техногенних умов,

2) виконувати геоміграційну схематизацію та обирати відповідну розрахункову схему,

3) здійснювати кількісні оцінки процесів міграції у підземних водах за допомогою аналітичних формул,

4) практично використовувати чисельні моделі геоміграції та проводити відповідні розрахунки за допомогою спеціального програмного забезпечення,

5) обґрунтовано обирати раціональні засоби очистки підземних вод,

6) проводити статистичну обробку даних щодо гідрохімічного режиму підземних вод.

Автор буде вдячний за всі зауваження щодо поліпшення викладеного матеріалу та структури посібника.

ПЕРЕЛІК ОСНОВНИХ ПОЗНАЧЕНЬ

- A – коефіцієнт асиметрії вибірки;
- C – мінералізація поверхневих та підземних вод,
концентрація речовини у підземних водах, г/л;
- D_0 – молекулярна дифузія, м²/добу,
- D_L, D_T – гідродинамічна дисперсія (конвективна дифузія), поздовжня
та поперечна, м²/добу,
- E – ексцес вибірки;
- F – площа, м²;
значення статистики, що перевіряється критерієм Фішера;
- H – рівень підземних вод, напір, м;
- K – коефіцієнт фільтрації, м/добу;
- K_d – коефіцієнт розподілу речовини між сорбентом та розчином,
м³/кг;
- L, l – довжина, м;
- M – маса, кг;
- Mx – математичне сподівання випадкової величини x ;
- m – товщина (потужність) водоносного або водотривкого шару,
м;
- N – концентрація речовини у сорбенті (твердій фазі), кг/м³;
- n – пористість, безрозмірна;
кількість вимірів або об'єм вибірки, безрозмірна;
- n_e – коефіцієнт ефективної пористості, безрозмірний;
- P – функція розподілу випадкової величини;
- p – щільність розподілу випадкової величини;
- Q – об'ємна витрата, дебіт, м³/добу,
- q – масовий питомий потік речовини, кг/(м²добу);
- r – радіальна координата в області міграції, м;
коефіцієнт кореляції між двома вибірками;
- S – статистична оцінка дисперсії вибірки;
- t – час, діб;
значення статистики, що перевіряється критерієм
Стьюдента;

- w – інфільтрація, м/добу;
 v – швидкість фільтрації, м/добу;
 x, y, z – декартові координати, м;
 Δ – різниця між величинами;
 $\Delta x, \Delta y$ – кроки скінченнорізницевої сітки уздовж осей Ox та Oy , м;
 δ_L, δ_T – параметр дисперсійності породи, поздовжньої та поперечної, м;
 γ – параметр кінетики неврівноваженої сорбції, 1/добу;
 питома вага розчину, $\text{кг}/(\text{м}^2\text{с}^2)$;
 λ – параметр розпаду речовини, 1/добу;
 μ_i – статистичний момент випадкової величини i -го порядку;
 σ – середньоквадратичне відхилення вибірки;
 Φ – потенціал швидкості фільтрації, $\text{м}^2/\text{добу}$,
 Ψ – функція течії фільтраційного потоку, $\text{м}^2/\text{добу}$,
 φ, ψ – криволінійні координати «еквіпотенціали – лінії течії», м;

$$\text{erf} - \text{інтеграл ймовірності, } \text{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt ,$$

$$\text{erfc}(x) = 1 - \text{erf}(x).$$

Розділ 1

ОСНОВИ ТЕОРІЇ МАСОПЕРЕНОСУ В ПІДЗЕМНИХ ВОДАХ

1.1. Фізико-хімічні основи масопереносу в підземних водах

Чинники масопереносу в ґрунтах. Конвективний перенос. Гідродинамічна дисперсія. Масообмін. Фізико-хімічні перетворення у водонасичених ґрунтах.

Чинники масопереносу в ґрунтах. Масоперенос у фільтраційному потоці являє собою сукупність процесів механічного переносу розчинених або емульсованих речовин, їхніх фізико-хімічних перетворень і масообміну з пористим середовищем.

Основні фактори масопереносу:

- 1) конвективний перенос (механічна або вимушена конвекція),
- 2) гідродинамічна дисперсія (конвективна дифузія),
- 3) масообмін,
- 4) фізико-хімічні перетворення (розпад, утворення нових речовин тощо).

Конвективний перенос. Під впливом вимушеної конвекції відбувається механічне переміщення частинок речовини у вигляді розчинів або колоїдів уздовж ліній течії фільтраційного потоку. Вважається, що при конвективному переносі рідина, що витісняє, повністю заповнює всі пори, а рідина, що витісняється, повністю залишає всі пори; при цьому має існувати чітка межа поділу двох рідин.

Швидкість переміщення фронту речовини за відсутності масообміну з пористим середовищем визначається як відношення швидкості фільтрації уздовж лінії течії $v(\varphi)$ до активної пористості n_a : $v^*(\varphi) = v(\varphi)/n_a$, де φ – криволінійна координата, відлічувана вздовж лінії течії (рис. 1.1). Частинка речовини за проміжок часу $[t_1, t_2]$ переміститься вздовж лінії течії на відстань $\varphi_2 - \varphi_1$, яка визначається з рівняння

$$t_2 - t_1 = \int_{\varphi_1}^{\varphi_2} \frac{d\varphi}{v^*(\varphi)}. \quad (1.1)$$

Якщо v_c^* – середнє значення швидкості міграції на інтервалі лінії течії $[\varphi_1, \varphi_2]$, то $t_2 - t_1 = (\varphi_2 - \varphi_1) / v_c^*$.

Гідродинамічна дисперсія. Неоднорідність пористого середовища (рис. 1.2) призводить до того, що вимушена конвекція супроводжується утворенням перехідної зони між областями потоку з максимальною і мінімальною концентраціями. Інтенсивність утворення перехідної зони кількісно характеризується коефіцієнтами гідродинамічної дисперсії, які відрізняються залежно від напрямку течії та неоднорідності порід. В однорідному ґрунті виділяють коефіцієнти повздовжньої (уздовж напрямку течії) і поперечної (перпендикулярно течії) дисперсії D_L і D_T , м²/добу. Встановлено [2, 4], що

$$D_L = D_0 + \delta_L |v|, \quad D_T = D_0 + \delta_T |v|, \quad (1.2)$$

де δ_L і δ_T – параметри повздовжньої і поперечної дисперсії, м; D_0 – коефіцієнт молекулярної дифузії, м²/добу, $D_0 = 10^{-5} \dots 10^{-4}$. Значення δ_L і δ_T для однорідних порід становлять $10^{-2} \dots 10^{-3}$ м, зростаючи до $10^0 \dots 10^2$ м у масивах добре проникних і тріщинуватих порід (пісковиках, крейдових відкладах).

Повздовжня дисперсія, як правило, на порядок більша за поперечну. Встановлено, що найчастіше коефіцієнт D_L перевищує D_T від 6 до 24 разів [4]. Теоретично визначити придатні для розрахунку значення параметрів дисперсії неможливо, тому при вирішенні практичних задач використовуються результати експериментальних вимірів.

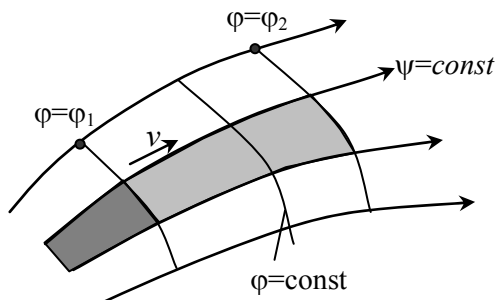


Рис. 1.1. Схема конвекції уздовж ліній течії фільтраційного потоку:
 $\varphi = \text{const}$ – екіпотенціали, $\psi = \text{const}$ – лінії течії

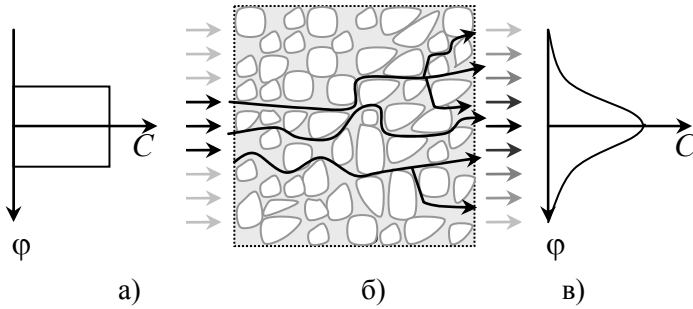


Рис. 1.2. Схема гідродинамічної дисперсії: а) профіль концентрації до входу в ґрунт, б) траєкторії міграції речовини в ґрунті, в) профіль концентрації після міграції

Масообмін. Сорбція (десорбція) являє собою процес зв'язування (звільнення) частинок речовини на поверхні зерен ґрунту. Процеси сорбції обумовлені поверхневими явищами на межі поділу «рідина – тверде тіло». Відповідно до моделі дифузійного примежового шару [7] на поверхні зерен сорбенту утворюється тонкий, практично нерухомий шар рідини товщиною менше ніж 1 мкм, куди внаслідок різниці електричного заряду притягаються і де затримуються частинки речовини з порового розчину (рис. 1.3).

Важливим параметром сорбції є питома ємність масообміну N_0 (мг-екв/г), що визначається як маса розчиненої речовини, яку може зв'язати чи поглинути сорбент. Через звивистість порових каналів та наявність тупикових пор при масообміні фактично використовується не вся ємність породи. При зменшенні розмірів частинок пористого середовища параметр N_0 збільшується, досягаючи в глинистих породах (монтморилоніти, каоліни) декількох десятків мг-екв на 100 г сухої маси сорбенту [23].

Параметром кінетики сорбції є швидкість масообміну γ , діб⁻¹, яка обернено пропорційна тривалості проміжку часу, протягом якого між розчином і сорбентом устанавлюється рівновага. Так, при іонному обміні та фізичній адсорбції рівновага досягається протягом декількох годин, а в умовах сорбції з утворенням хімічних зв'язків – кількох діб [5, 7, 23]. Тому масообмін, що триває місяці і роки,

можна описувати за допомогою ізотерм рівноважної сорбції вигляду $N=f(C)$, де N – концентрація речовини у сорбенті, C – у розчині.

При малих концентраціях речовини у поровому розчині справедлива лінійна залежність (ізотерма Генрі) (рис. 1.4)

$$N = \bar{K}_d C, \quad \bar{K}_d = K_d \rho_{sk} (1 - n), \quad (1.3)$$

де K_d – коефіцієнт розподілу, що залежить від речовини, властивостей порід, мінералізації порового розчину, присутності в ньому інших домішок тощо [5, 12]; ρ_{sk} – щільність скелета ґрунту. Кількість поглиненої речовини залежить також від швидкості фільтрації. При високих концентраціях співвідношення між N і C більш точно визначається ізотермою Ленгмюра, що можна записати у вигляді

$$N = \frac{\bar{K}_d C}{1 + \bar{K}_d C / N_0}. \quad (1.4)$$

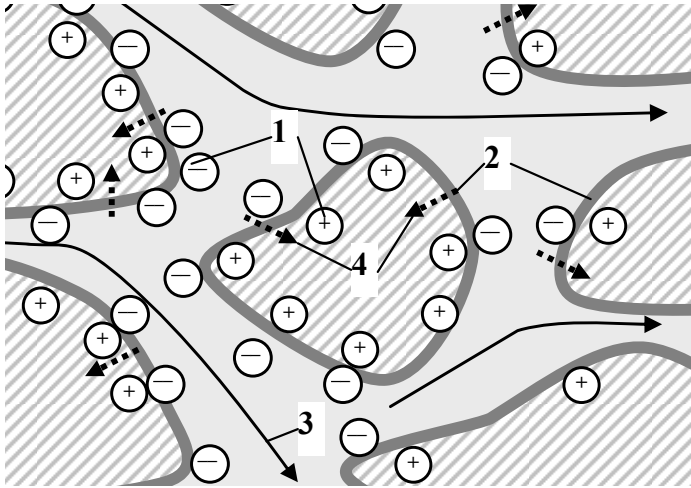


Рис. 1.3. Схема адсорбції на поверхні зерен ґрунту:
 1 – електрично заряджені частинки, 2 – малорухомий шар рідини навколо твердих частинок, 3 – напрямки руху рідини в порах, 4 – поглинання речовини сорбентом

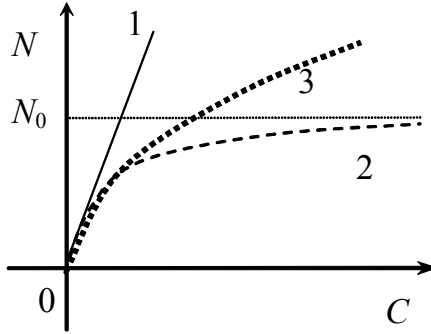


Рис. 1.4. Ізотерми рівноважної сорбції:
1 – Генрі, 2 – Ленгмюра, 3 – Фрейндліха

При малих концентраціях речовини у розчині C ізотерма Ленгмюра (1.4) близька до ізотерми Генрі (1.3), оскільки $N \approx \bar{K}_d C$, при значних – сорбент майже цілком насичується і концентрація твердої фази сягає максимально можливого значення ($N \approx N_0$). Для опису сорбції в багатьох випадках використовується також ізотерма Фрейндліха $N = kC^\gamma$, де k та γ – емпіричні параметри.

Нерівноважний масообмін описується звичайними диференціальними рівняннями, які в загальному випадку є нелінійними. При малих концентраціях C може бути використана ізотерма Генрі

$$\frac{\partial N}{\partial t} = \gamma(\bar{K}_d C - N). \quad (1.5)$$

Знак похідної характеризує напрямок процесу: якщо концентрація речовини у розчині більша, ніж її рівноважна концентрація, тобто при $C > N/\bar{K}_d$, тоді $\partial N/\partial t > 0$ і відбувається сорбція, якщо ж концентрація речовини у розчині менша за її рівноважну концентрацію ($C < N/\bar{K}_d$), то $\partial N/\partial t < 0$ і відбувається десорбція, тобто перехід речовини з сорбенту до розчину.

Необоротна сорбція з міцною фіксацією речовини сорбентом може бути описана рівнянням вигляду

$$\partial N/\partial t = \alpha C, \quad (1.6)$$

тобто швидкість поглинання пропорційна кількості речовини в розчині, причому ємність сорбенту вважається необмеженою.

Фізико-хімічні перетворення у водонасичених ґрунтах. Розчинення і кристалізація описуються рівнянням

$$\partial N/\partial t = \gamma(C - C_{max}) N^{\beta}, \quad (1.7)$$

де C_{max} – концентрація, що відповідає максимально можливій розчинності речовини; α , β , γ – емпіричні параметри. З рівняння (1.7) випливає, що при перевищенні концентрацією речовини в розчині граничного значення C_{max} починається кристалізація та випадіння осаду ($\partial N/\partial t > 0$) і концентрація речовини в твердій фазі збільшується. Якщо ж концентрація речовини в розчині C менша за C_{max} ($\partial N/\partial t < 0$), то відбувається розчинення кристалів і концентрація речовини в твердій фазі зменшується.

Міграція речовин супроводжується процесами їхньої деструкції (розпаду) з утворенням дочірніх компонентів. Зменшення концентрації початкової (материнської) речовини C_1 описується рівнянням реакції першого порядку

$$\frac{\partial C_1}{\partial t} = -\lambda_1 C_1, \quad (1.8)$$

де λ_1 – параметр розпаду, дб^{-1} , $\lambda_1 = \ln 2/T_1$; T_1 – період піврозпаду речовини. Зменшення концентрації C_1 відбувається зі швидкістю, що пропорційна поточній кількості речовини в розчині. Інтенсивність утворення дочірньої речовини при розпаді материнської описується рівнянням

$$\frac{\partial C_2}{\partial t} = \lambda_1 C_1 - \lambda_2 C_2, \quad (1.9)$$

де λ_2 – параметр розпаду дочірньої речовини, що визначається аналогічно λ_1 . З часом концентрація дочірньої речовини може зростати, якщо швидкість її убування $\lambda_2 C_2$ менша за $\lambda_1 C_1$ – швидкість її утворення при розпаді материнської речовини.

У разі радіоактивного розпаду параметри λ_1 та λ_2 є константами, для хімічних та біологічних перетворень ці параметри можуть змінюватися під впливом температури, хімічного складу води тощо.

Питання для самоконтролю

1. Який параметр з двох є більшим і чому: швидкість фільтрації чи швидкість міграції речовини, що сорбується (не сорбується)?
2. Охарактеризуйте механізм та параметри гідродинамічної дисперсії.
3. Порівняйте різні види сорбції. Чому ізотерма Генрі рівноважної сорбції широко застосовна при описі міграції у підземних водах?
4. Який чинник може бути врахований ізотермами нерівноважної сорбції?
5. У чому полягає сутність необоротної сорбції?
6. Охарактеризуйте основні фізико-хімічні перетворення у водонасичених ґрунтах при міграції розчинених речовин.
7. Яка ізотерма сорбції є більш загальною і чому: Генрі чи Ленгмюра?

1.2. Рівняння масопереносу в підземних водах

Система рівнянь фільтрації та масопереносу. Основні рівняння масопереносу в підземних водах. Межові умови.

Система рівнянь фільтрації та масопереносу. Шуканими величинами при розрахунку масопереносу у фільтраційних потоках є концентрації речовини в поровому розчині C і в твердій фазі N . Для кількісного опису масопереносу в підземних водах виділяється елементарний об'єм породи, насиченої водою (рис. 1.5), для якого записуються такі співвідношення [1, 2, 3, 19]:

а) рівняння переносу і дифузії речовини уздовж осей координат Ox , Oy , Oz

$$q_x = v_x C - D_x \frac{\partial C}{\partial x}, \quad q_y = v_y C - D_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad q_z = v_z C - D_z \frac{\partial C}{\partial z}, \quad (1.10)$$

де $v_x C$, $v_y C$, $v_z C$ – складові конвективного переносу;

$$-D_x \frac{\partial C}{\partial x}, \quad -D_y \frac{\partial C}{\partial y}, \quad -D_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad \text{– складові дифузійного переносу;}$$

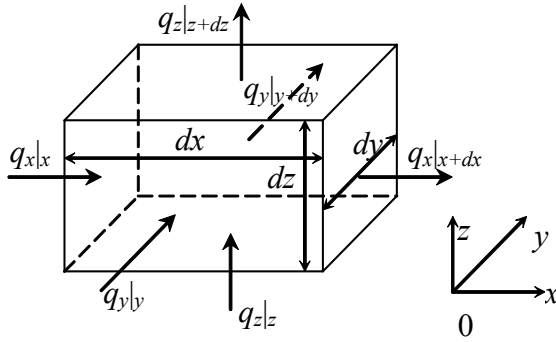


Рис. 1.5. Схема масопотоків у елементарному об'ємі водонасиченої породи

б) рівняння балансу маси речовини

$$-\frac{\partial q_x}{\partial x} - \frac{\partial q_y}{\partial y} - \frac{\partial q_z}{\partial z} + q = \frac{\partial(1-n)N}{\partial t} + \frac{\partial(nC)}{\partial t}; \quad (1.11)$$

в) ізотерми масообміну та сорбції:

$$\frac{\partial N}{\partial t} = f(C, N, C^*, N^*, \gamma, \gamma^*), \quad F(C^*, N^*, \gamma^*) = 0. \quad (1.12)$$

Тут v_x, v_y, v_z – компоненти швидкості фільтрації, м/добу; D_x, D_y, D_z – коефіцієнти гідродинамічної дисперсії (конвективної дифузії), м²/добу; q_x, q_y, q_z – компоненти масової швидкості розчиненої речовини кг/(м²·добу); C і N – масові концентрації речовини в рідкій і твердій фазах, кг/м³ (на одиницю об'єму розчину і гірської породи); C^* і N^* – ті ж концентрації в умовах адсорбційної рівноваги; γ і γ^* – параметри сорбції; q – інтенсивність внутрішніх джерел речовини (кг/(м²·добу)) у виділеному об'ємі $dx \cdot dy \cdot dz$.

Рівняння (1.10) – (1.12) слід розглядати разом з рівнянням фільтрації

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K \frac{\partial H}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K \frac{\partial H}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K \frac{\partial H}{\partial z} \right) + Q = n \frac{\partial H}{\partial t}, \quad (1.13)$$

де K – коефіцієнт фільтрації; H – напір підземних вод; Q – інтенсивність джерел надходження води до області фільтрації; n – пористість.

Система (1.10) – (1.13) містить 12 рівнянь з 12 невідомими. Параметри в'язкості, щільності порід, густини порового розчину, пористості й проникності, що входять до рівнянь, залежать від концентрацій C і N . Однак при малих концентраціях речовини у розчині (до 10 г/л) і незначних змінах температури зазначені параметри можна вважати сталими і розраховувати спочатку фільтрацію, а на основі поля її швидкостей – перенос речовин.

Основні рівняння масопереносу в підземних водах. Підставляючи (1.10) у (1.11), можна записати рівняння конвективної дифузії

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_x C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_y C \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} - v_z C \right) + q = (1-n) \frac{\partial N}{\partial t} + n \frac{\partial C}{\partial t}. \end{aligned} \quad (1.14)$$

У випадку рівноважної оборотної сорбції, описуваної ізотермою Генрі (1.3), це рівняння можна записати у вигляді

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_x C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_y C \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} - v_z C \right) + q = n_e \frac{\partial C}{\partial t}, \end{aligned} \quad (1.15)$$

де $n_e = n + (1-n)\bar{K}_d$ – коефіцієнт ефективною пористості, що враховує лінійну оборотну рівноважну сорбцію.

При розпаді (деструкції) речовини в ліву частину рівняння масопереносу додається добуток $-n_e \lambda C$ відповідно до рівняння (1.6).

Для фільтраційного потоку, горизонтальні розміри якого на один-два порядки більші за його вертикальні розміри, можна усереднити концентрацію речовини за товщиною водоносного шару і замість (1.15) записати більш просте двовимірне рівняння

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} - v_x \bar{C} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} - v_y \bar{C} \right) + q - q_{v,1} - q_{v,2} = n_e \frac{\partial \bar{C}}{\partial t}, \quad (1.16)$$

де \bar{C} – усереднена уздовж вертикалі концентрація речовини у поровому розчині; m – потужність водоносного горизонту; $q_{v,1}$, $q_{v,2}$ – масопотоки через його верхню і нижню межі – покрівлю та підшову.

Межові умови. На межах області масопереносу в підземних водах найбільш часто задаються наведені далі умови [2, 3] (рис. 1.6).

1. Концентрація на межі Γ області фільтрації

$$C(x, y, z, t) \Big|_{\Gamma} = C_{\Gamma}. \quad (1.17)$$

Дана умова справедлива при високих вхідних швидкостях фільтраційного потоку, коли на межі миттєво утворюється зона з концентрацією C_{Γ} . На вихідній межі ця умова відповідає миттєвому відведенню речовини за рахунок течії у водотоці або значному розбавленню у водоймищі.

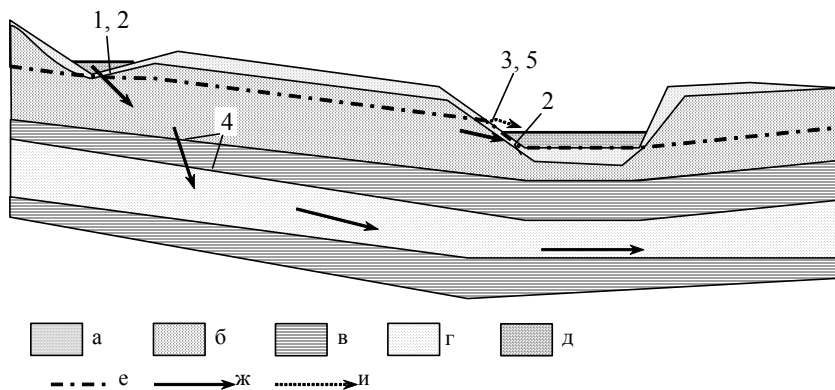


Рис. 1.6. Схема меж області масопереносу, 1...5 – типи меж (1.17) – (1.22): а) верхній шар ґрунту, б) породи верхнього водоносного шару, в) слабопроникний прошарок, г) добре проникний водоносний шар, д) поверхневий водотік (водойма), е) рівень ґрунтових вод, ж) напрямок міграції через поверхню землі, и) напрямок міграції у підземних водах

2. Умова Данквертса–Бреннера

$$-D \frac{\partial C}{\partial l} \Big|_{\Gamma} + v_l C = v_l C_{\Gamma} \quad \text{або} \quad D \frac{\partial C}{\partial l} \Big|_{\Gamma} = v_l (C - C_{\Gamma}) \quad (1.18)$$

відповідає балансу речовини на межі: потік речовини з поверхневого водотоку (водоймища) дорівнює сумі конвективного і дифузійного потоків до водоносного горизонту. Тут l – вектор нормалі до межі Γ , v_l – швидкість уздовж напрямку l . На відміну від умови (1.17), концентрація на вхідній межі не одразу буде дорівнювати C_{Γ} . На вихідній межі умова (1.18) означає відведення речовини до річки або водоймища, якщо концентрація речовини там дорівнює C_{Γ} .

3. Умова

$$\frac{\partial C}{\partial l} \Big|_{\Gamma} = 0 \quad (1.19)$$

відповідає випадку витікання підземних вод через поверхню землі на ділянці височування, коли внаслідок порушення суцільності потоку винесення речовини через межу можливе тільки шляхом конвекції.

Умова рівності нулю градієнта концентрації вигляду (1.19) може прийматися також на дуже віддалених межах і означати незмінність концентрації речовини у підземних водах.

4. На межі поділу двох порід з різними властивостями задаються умови рівності концентрацій і масопотоків

$$C_1 = C_2, \quad (1.20)$$

$$n_1 \left(D_{x,1} \frac{\partial C_1}{\partial x} - v_{x,1} C_1 \right) = n_2 \left(D_{x,2} \frac{\partial C_2}{\partial x} - v_{x,2} C_2 \right), \quad (1.21)$$

аналогічно (1.21) формулюється умова для компонентів потоку речовини уздовж осей Oy та Oz . Індексами «1» і «2» позначені параметри у двох різних породах.

5. При повному або частковому випаровуванні поблизу вихідної межі відбувається накопичення речовини. Її винесення з області можливе лише конвективним шляхом, причому питомий об'єм води, що стікає, зменшується за рахунок випаровування і складає $(1 - \alpha) v$, де $\alpha = \varepsilon / v_l$, тут ε – інтенсивність випаровування, мм/добу. Такому процесу відповідає умова

$$D \frac{\partial C}{\partial l} \Big|_{\Gamma} + \alpha v_l C = 0, \quad (1.22)$$

а масопотік через таку межу $q_{\Gamma} = (1 - \alpha) v_l C$.

Питання для самоконтролю

1. Які параметри входять до системи рівнянь фільтрації та масопереносу у водонасичених ґрунтах і яка їхня розмірність?
2. Які процеси та чинники враховує рівняння балансу маси (1.11)?
3. Що слід розраховувати спочатку: фільтрацію чи масоперенос?
4. За яких умов можна розраховувати масоперенос та фільтрацію окремо? Коли ці процеси обов'язково розраховувати разом?
5. Як можна спростити тривимірне рівняння масопереносу (1.14)? За рахунок яких припущень?
6. У чому полягає основна відмінність між граничними умовами (1.18), (1.19), (1.22)?
7. Яка умова є більш загальною і чому: (1.17) чи (1.18)?

1.3. Принципи геоміграційної схематизації

Схематизація структури області. Усереднення концентрації за потужністю пласта. Схематизація джерел надходження речовини до області міграції. Точкові, лінійні, площинні та об'ємні джерела. Схематизація кінетики масообміну та умов фільтрації.

Метою геоміграційної схематизації є спрощення опису міграції у підземних водах, яке дозволяє застосовувати наявні моделі переносу речовин у конкретних природних умовах. При цьому схематизується структура області міграції, її межі, внутрішні джерела та шляхи надходження речовин до водоносного горизонту, умови масообміну та неоднорідність області міграції.

Схематизація структури області. Найбільш повне уявлення про міграцію в підземних водах дає поле швидкостей фільтраційної течії, на основі якого розраховується перенос речовин. Оскільки картина

фільтрації часто є досить складною, для спрощення розрахункової схеми міграції використовують такі два підходи [1, 2, 3, 11, 14, 24]:

1) заміна тривимірного масопереносу послідовністю вертикальної міграції у верхніх шарах ґрунту (зоні аерації) та горизонтальної міграції у водоносному горизонті; яка описується рівнянням (1.16);

2) розрахунок одновимірної міграції уздовж ліній течії фільтраційного потоку, побудованих на основі розрахунку рівня підземних вод.

Обидва підходи застосовуються з метою зменшення розмірності області міграції та спрощення розрахункових співвідношень. Перший підхід є доцільним для водоносних шарів, горизонтальні розміри яких значно, на один-два порядки, перевищують вертикальний. Таке співвідношення геометричних розмірів відповідає припущенням гідравлічної теорії фільтрації, згідно з якими швидкість фільтрації вважається незмінною уздовж вертикалі, а напір усереднюється за потужністю пласта. Тоді на основі рівняння двовимірного масопереносу (1.16) розраховується концентрація, усереднена вздовж вертикалі.

Припущення відносно усереднення концентрації є справедливим з повного моменту часу, який залежить від потужності пласта, дифузії у ньому та у слабопроникних водотривких шарах, а також сорбційних властивостей порід. У загальному вигляді це може бути визначено зіставленням розрахунків, проведених за допомогою двох тривимірних моделей.

Усереднення концентрації за потужністю пласта. У спрощеній ситуації, наприклад, для пласта, обмеженого майже непроникними водотривкими шарами зверху та знизу (рис. 1.7), можна оцінити момент часу, після якого концентрація вважається усередненою. Для цього використовується критерій

$$\eta_0 = \sqrt{\frac{D_z t}{n_e m^2}}, \quad (1.23)$$

де D_z – коефіцієнт дифузії у поперечному напрямку, t – час, n_e – параметр ефективності пористості, m – потужність водоносного горизонту.

При $\eta_0 > 1$, тобто при $t > n_e m^2 / D_z$, можна вважати, що вирівнювання концентрації відбулося. Наприклад, для

$D_z = 0,1 \text{ м}^2/\text{добу}$, $m = 10 \text{ м}$, $n_e = 2$ це станеться через 2000 діб ($\approx 5,5$ року). Фактично концентрація вирівнюється на відстані, що перевищує $v^* t$. Якщо $v = 0,1 \text{ м/добу}$, то реальне усереднення станеться через 100 м від джерела надходження речовини у фільтраційний потік.

Слід зазначити, що нерівномірність розподілу концентрації уздовж вертикалі практично неважлива для водоносних горизонтів малої потужності. У разі водовідбору зі свердловини, особливо довершеної, вода з різних глибин змішується і усереднення відбувається вже у самій свердловині. В реальних умовах певна частина речовин з водоносного горизонту поглинається у водотривких шарах, які обмежують його зверху та знизу (рис. 1.7).

При побудові моделей міграції використовуються такі спрощення, що дозволяють отримати більш компактні та зручніші розрахункові формули:

1) вертикальні масопотоки $q_{v,1}$ та $q_{v,2}$ вважаються незначними і не враховуються,

2) міграція у водоносному горизонті обумовлена лише конвекцією, а у водотривких шарах – тільки дифузиею.

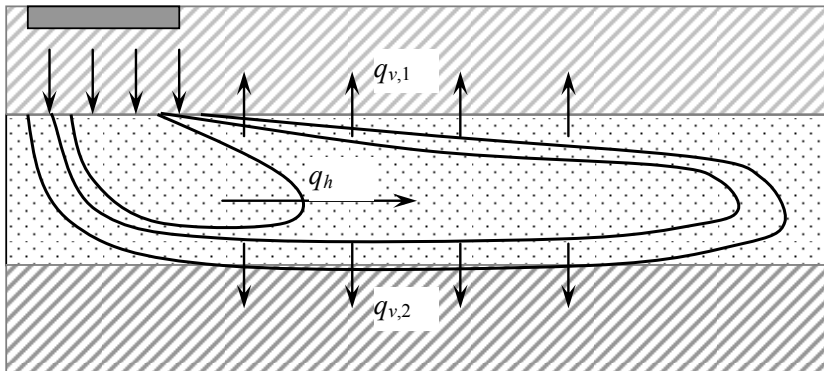


Рис. 1.7. Схематизація масопотоків у водоносному горизонті, обмеженому слабopроникними шарами: q_h – горизонтальний потік речовини, $q_{v,1}$ та $q_{v,2}$ – вертикальні потоки речовини

Подальшим спрощенням форми області є відокремлення характерних ліній течії фільтраційного потоку, вздовж яких незалежно одна від одної розраховується міграція речовин. Описаний підхід адекватний реальним умовам у разі значної ширини зони розтікання; він також застосовний для отримання попередніх оцінок динаміки міграції. Розраховані значення концентрації в рамках одновимірної моделі є завищеними через неврахування впливу поперечної дисперсії.

Межі області міграції можна схематизувати відповідно до напрямку фільтраційної течії. На вхідних межах швидкість фільтрації направлена всередину області, на вихідних – навпаки. Внутрішні межі відповідають контакту двох шарів (зон) з різними властивостями у породному масиві.

Схематизація джерел надходження речовини до області міграції. Всі такі джерела умовно поділяються на гідродинамічно активні – такі, що змінюють структуру фільтраційної течії, та гідродинамічно пасивні, які практично не впливають на розподіл рівня підземних вод.

Витрата рідини, що надходить з гідродинамічного активного джерела до підземних вод, є домірною витраті фільтраційного потоку. До таких джерел відносять діючі шламосховища, водовідстійники, накопичувачі, через днище яких фільтруються розчини, що містять токсичні речовини. Пасивними у гідродинамічному відношенні можна вважати звалища або сховища твердих відходів, де відбувається вилуговування та розчинення токсичних речовин. До таких джерел можна віднести також зони у водоносних пластах, сформовані після припинення нагнітання рідких відходів, лінзи залишкових технологічних розчинів після підземного вилуговування тощо. Фільтраційною витратою гідродинамічно пасивних джерел у порівнянні з витратою потоку підземних вод можна знехтувати.

Залежно від часу дії можна виділити умовно миттєві, «пакетні» та постійно діючі джерела. Час дії миттєвого джерела t_s має бути на два порядки менший, ніж період прогнозу чи розрахунку t_p , тобто можна прийняти $t_s/t_p < 0,01$. Це можуть бути аварійні короткотермінові просочування розчинів, що містять токсичні речовини, наприклад, після проривів каналізаційних мереж, нафтопроводів, дамб

шламонакопичувачів тощо. Миттєве джерело в моделі задається як розподіл початкової концентрації речовини у водоносному горизонті.

Якщо час дії джерела менший, ніж час прогнозу, при цьому порівняний з ним ($0,01 < t_s/t_p < 0,3$), то застосовна схема «пакетного» надходження речовини з певною інтенсивністю до області міграції. Так може бути схематизоване, наприклад, закачування промислових стоків до підземних водоносних горизонтів протягом кількох років та подальша міграція тривалістю кілька десятиліть.

У разі надходження речовини до області міграції протягом більшої частини прогнозного періоду джерело розглядається як постійно діюче. Його інтенсивність змінюється у часі й у просторі. Так, у разі фільтраційних втрат із хвостосховища найбільш інтенсивним буде потік речовин до водоносного горизонту на тих ділянках, де відстань між рівнем ґрунтових вод та днищем є мінімальною. На інших ділянках, у тому числі поблизу берегів хвостосховища, масопотік зменшується за рахунок меншої швидкості низхідної фільтрації та більшої потужності зони аерації. Звичайно, у таких оцінках слід враховувати неоднорідність області вертикальної міграції.

Залежно від форм та розмірів можна виділити точкові, лінійні, площинні та об'ємні джерела надходження речовини до області міграції (рис. 1.8 та 1.9).

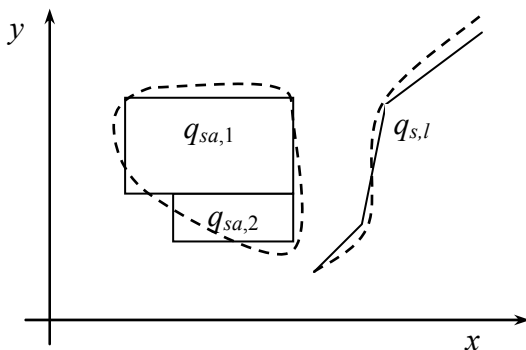


Рис. 1.8. Геометрична схематизація джерел надходження речовин у водоносний горизонт: штрихові криві – реальні контури, суцільні лінії – їхня апроксимація

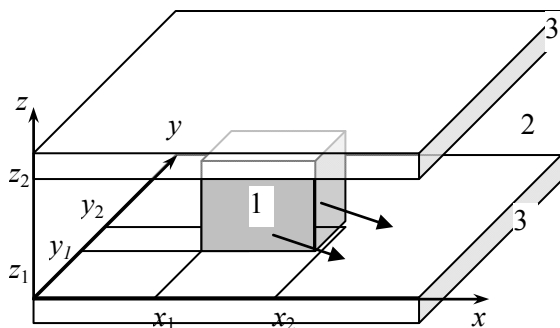


Рис. 1.9. Схема об'ємного джерела (1) надходження речовин у водоносний горизонт (2), обмеженого водотривкими шарами (3)

Точковим джерелом можна вважати ділянку, площа якої на 4 – 5 порядки менша за площу всієї області міграції. Так, ділянку витоків зі сховища відходів або місця зберігання токсичних речовин площею 10×10 м можна розглядати як точкове джерело в області з характерним розміром у плані понад 1000 м. Інтенсивність точкового джерела характеризується функцією $q_p(t)$ з розмірністю кг/добу або кг/с. Як точкове джерело (стік) в плановому фільтраційному потоці можна розглядати свердловину, яка нагнітає або відкачує воду.

Лінійне джерело має протяжну форму, причому один з його розмірів L_d є порівняним з характерним розміром області міграції L_m , а інший розмір джерела L_t значно менший за L_m . Наприклад, як лінійне джерело можна розглядати траншею шириною $L_t < 10$ м та довжиною $L_d > 100$ м в області міграції з характерним розміром $L_m > 100 \dots 300$ м, яка заповнена твердими відходами, з яких вилуговуються токсичні речовини. Прикладами лінійного джерела є трубопроводи, з яких можливі втрати рідин, нагнітальні або відкачувальні свердловини у тривимірному потоці на невеликій за площею ділянці. Лінійне джерело (стік) задається координатами точок контуру та питомою інтенсивністю $q_l(t)$ з розмірністю кг/(м·добу) чи кг/(м·с).

Площинним джерелом можна вважати ділянку, яка на 1 – 3 порядки менша за площею, ніж уся область міграції. Так, шламонакопичувач або водовідстійник з характерними розмірами від

100 до 400 м розглядається як площинне джерело в області площею до 1 км^2 . Якщо площу цього джерела можна зіставити з площею всієї області (наприклад, для $S_{sr} > 0,2 S$), то доцільно використовувати інші схеми міграції. Так, можна обмежити область міграції зовнішнім контуром джерела і розраховувати перенос речовин лише в тій частині фільтраційного потоку, що не містить внутрішніх джерел речовин. Площинне джерело визначається точками контуру, які обмежують його ділянку, а також питомою інтенсивністю q_a з розмірністю $\text{кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{добу})$ чи $\text{кг}/(\text{м}^2 \cdot \text{с})$. Як площинне джерело в тривимірному фільтраційному потоці можна розглядати ділянку на покрівлі водоносного горизонту, через яку розчинені речовини надходять із зони аерації.

Об'ємне джерело (стік) характеризує інтенсивність надходження (зменшення маси) речовини до області міграції внаслідок фізико-хімічних перетворень: розчинення, вилуговування, осадження, десорбції тощо. Об'ємні джерела розташовані всередині області міграції, тобто розглядаються як її невід'ємна частина. Їхнім прикладом є тверді відходи у насиченому водою ґрунті, з яких вилуговуються розчинні речовини. Такі джерела визначаються поверхнями, які обмежують в породному масиві місця розташування відходів. Інтенсивність об'ємних джерел q_v ($\text{кг}/(\text{м}^3 \cdot \text{с})$ або $\text{кг}/(\text{м}^3 \cdot \text{добу})$) визначається на основі експериментальних досліджень кінетики масообміну на мікрорівні, в масштабі окремих тріщин та пор.

Інтенсивність потоку маси речовини q до водоносного горизонту у рівняннях (1.12) – (1.14) визначається залежно від розмірності області міграції. Так, ділянка надходження речовини у двовимірний горизонтальний фільтраційний потік апроксимується як площинне внутрішнє джерело, а для тривимірної області міграції – як поверхневе джерело на покрівлі водоносного горизонту. Тому інтенсивність деяких об'ємних джерел, наприклад твердих радіоактивних відходів, розраховується на основі швидкості вилуговування з їхньої поверхні, $\text{мг}/(\text{см}^2 \cdot \text{добу})$.

Схематизація кінетики масообміну та умов фільтрації. При прогнозуванні міграції речовин у підземних водах використовуються такі припущення.

1. При малих концентраціях забруднювальних речовин їхній перенос не робить істотного впливу на динаміку фільтраційного

поток, тому розрахунок рівня підземних вод виконується незалежно від розрахунку міграції.

2. Якщо фільтраційний потік є сталим, то розрахунок міграції можна виконувати на основі попередньо визначеного поля швидкостей фільтрації.

3. При прогнозуванні міграції на тривалі періоди можна нехтувати кінетикою сорбції, а при малих концентраціях речовини в розчині – скористатися лінійною ізотермою сорбції (1.3).

4. Для піщаних та суглинистих порід допустимо прийняти схему пористого середовища, для якої застосовні положення механіки суцільного середовища; для масивів тріщинуватих порід більш адекватними є схеми, викладені у підрозділі 1.4.

Питання для самоконтролю

1. Охарактеризуйте спрощення, застосовні для опису структури області міграції.

2. Визначте діапазони часу та відстані, для яких застосовна двовимірна схема міграції у водоносному пласті з параметрами: $m = 8$ м, $n_e = 1$, $v = 0,05$ м/добу, $D_z = 0,1$ м²/добу.

3. За яких умов слід враховувати нерівномірний розподіл концентрації за потужністю пласта?

4. Як зміниться розрахована концентрація у водоносному горизонті в разі нехтування вертикальними потоками маси через верхній і нижній водотривкі шари?

5. У чому полягає відмінність між гідродинамічно активними та пасивними джерелами?

6. Охарактеризуйте різні типи джерел надходження речовин до водоносного горизонту відносно періоду їхньої дії.

7. Охарактеризуйте різні типи джерел надходження речовин до водоносного горизонту відповідно до їхньої форми.

8. Порівняйте розмірності параметру інтенсивності миттєвих та постійно діючих джерел різної форми.

9. Розкрийте зміст припущень відносно схематизації кінетики масообміну та умов міграції у підземних водоносних горизонтах.

1.4. Особливості міграції в неоднорідних породних масивах

Тріщинно-блокова структура. Міграція вздовж шарів. Міграція перпендикулярно шарам.

При геоміграційній схематизації можна виділити впорядковану та невпорядковану неоднорідності, масштаб яких змінюється від рівня окремих тріщин до цілого породного масиву. Розглянемо більш детально характерні типи неоднорідності в області міграції, які формують такі структури: 1) тріщинно-блокову, яку за певних умов можна вважати однорідною, 2) шарувату, коли міграція відбувається уздовж меж, що розділяють шари, 3) шарувату, в якій міграція спрямована перпендикулярно до меж поділу шарів.

Тріщинно-блокова структура. Для опису міграції в таких породах використовується схема пористо-тріщинуватого середовища з подвійною ємністю, яке являє собою умовно однорідну систему слабопроникних блоків, рівномірно прорізаних каналами з високою провідністю [12] (рис. 1.10).

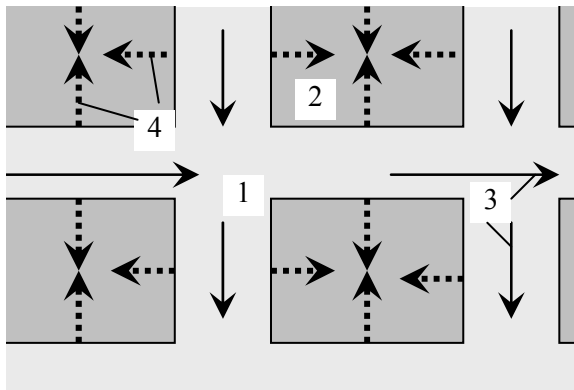


Рис. 1.10. Схема міграції у тріщинно-блоковому середовищі: 1 – проникні канали (тріщини), 2 – слабопроникні блоки, 3, 4 – напрямки конвективного і дифузійного переносу відповідно

У карбонатних породах це великі тріщини, що займають близько 1 % всього об'єму (тріщинна пористість $n_f < 0,01$), а блоки являють собою слабопроникний матеріал з пористістю $n_b \leq 0,15$. У глинах – це канали з високою провідністю, сформовані прошарками більш грубого піщаного матеріалу.

Згідно зі схемою пористо-тріщинуватого середовища вважається, що розчинені речовини переносяться в тріщинах тільки конвективним шляхом, а в блоках – лише за рахунок дифузії. На першому етапі міграції можна використовувати схему необмеженої ємності блоку, вважаючи, що розмір блоку не впливає на масопотік. Через певний час, коли блоки частково насичуються речовинами, застосовується схема зосередженої ємності, яка умовно сконцентрована у центрі блоку [12].

Рівняння нерівноважного масообміну між тріщинами та порами може бути записано у вигляді

$$n_b \frac{\partial C_b}{\partial t} = \alpha (C_f - C_b), \quad (1.24)$$

де α – параметр кінетики масообміну, що залежить від пористості блоків, їхньої проникності, площі поверхні блоку та дифузії в ньому; C_f та C_b – концентрації речовини в порах блоків і у тріщинах відповідно.

У схемі необмеженої ємності вважається, що концентрація в блоках незначна порівняно з концентрацією в тріщинах, тобто блоки мало насичені речовиною. Тоді рівняння масообміну записується у вигляді:

$$n_b \frac{\partial C_b}{\partial t} = \alpha C_f. \quad (1.25)$$

З рівняння (1.25) випливає, що зростання концентрації у блоках прямо пропорційно концентрації речовини у тріщинах.

В роботах [12, 14] показано, що схема необмеженої ємності застосована до моментів часу t , що не перевищують величину t^*

$$t^* < \frac{\chi n_b^2 L_b^2}{D_m}, \quad (1.26)$$

де χ – числовий коефіцієнт, що змінюється в діапазоні від 0,15 до 0,5; L_b – середній розмір блоку.

При застосуванні схеми пористо-тріщинуватого середовища слід зважати на внутрішню неоднорідність блоків, умовність величини L_b та часто знижену проникність поверхні блоків, що уповільнює масообмін з тріщинами. Наприклад, якщо середній розмір блоків $L_b = 0,5$ м, їхня пористість $n = 0,15$, коефіцієнт дифузії $D_m = 10^{-5}$ м²/добу, то схема необмеженої ємності застосована для періоду до 750 діб, після чого слід використовувати схему зосередженої ємності.

Міграція вздовж шарів. У цьому разі можливі такі спрощення процесу:

- 1) горизонтальний перенос у кожному проміжному шарі розраховується ізольовано, незалежно від міграції у сусідніх шарах,
- 2) перенос відбувається лише конвективним шляхом, а масообмін із сусідніми шарами – за рахунок дифузії,
- 3) перенос у горизонтальному напрямі відбувається за рахунок конвекції та дифузії, а масообмін між шарами – за рахунок дифузії.

Врахування дифузії у випадку 3) є більш адекватним, але ускладнює розрахункові співвідношення.

Згідно зі схемою пошарового переносу [12, 14] загальна кількість речовини у водоносному горизонті визначається підсумовуванням її маси (концентрації) в кожному шарі. Середнє значення концентрації речовини \bar{C} в шаруватому горизонті загальною потужністю m , що складається з N шарів потужністю m_i (рис. 1.11), розраховується за формулою

$$\bar{C} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^N m_i C_i, \quad (1.27)$$

а питомий (на одиницю ширини потоку) сумарний потік речовини –

$$\bar{q} = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^N m_i v_i C_i. \quad (1.28)$$

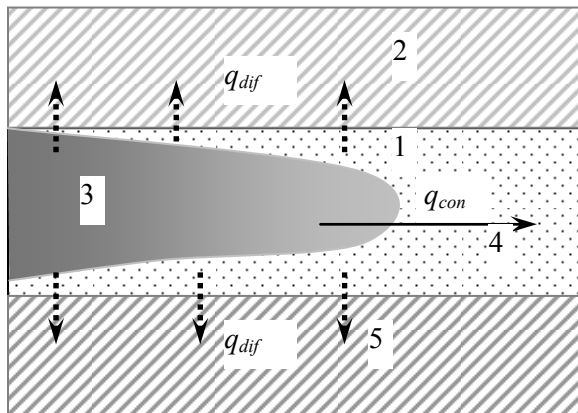


Рис. 1.11. Схема пошарового переносу у водоносному горизонті: 1 – проникний шар, 2 – слабопроникний шар, 3 – зона поширення речовини, 4 – напрямок конвекції, 5 – напрямок дифузії

Ізольований розрахунок міграції допустимий у разі, коли властивості сусідніх шарів порівняні між собою. Якщо ж шари суттєво відрізняються за властивостями порід, наприклад, на контакті проникного та слабопроникного ґрунтів, слід враховувати дифузійний масообмін між ними. Хоча паралельно триває конвективний перенос, ним можна знехтувати, якщо горизонтальна швидкість фільтрації набагато більша, ніж вертикальна. Тривалість проміжку часу, коли застосована схема переносу вздовж шарів, оцінюється так:

$$t < (0,1...0,3) \frac{n_1^2 m_1^2}{n_2 D_m}, \quad (1.29)$$

де n_1 , n_2 – пористість проникного та слабопроникного шарів відповідно; m_1 – потужність проникного шару.

Наприклад, для проникного шару потужністю $m_1 = 1$ м, пористістю $n_1 = n_2 = 0,3$ та коефіцієнтом дифузії $D_m = 2 \cdot 10^{-5}$ м²/добу час t не перевищить $(1,4...4) \cdot 10^4$ діб. Таким чином, у разі

масообміну, що контролюється молекулярною дифузією, ця схема застосовна протягом кількох десятків років.

Дана схема задовільно описує міграцію в піщаних пластах з глинистими прошарками. Слід зважати, що у випадках 1) і 3) концентрація усереднюється за потужністю водоносного горизонту. З іншого боку, масообмін безпосередньо відбувається у невеликих шарах: на водотривкому шарі та підшві, де концентрація у кілька разів менша за рахунок неповного перемішування по вертикалі. Більш доцільним є використання тривимірних або профільних моделей міграції, які враховують кінетику масообміну на поверхні водотривких шарів.

Міграція перпендикулярно шарам. Для врахування шаруватої неоднорідності можна застосовувати спосіб, заснований на такому припущенні: перенос у кожному нижньому шарі (рис. 1.12, а) не впливає на перенос речовин у розташованих вище шарах порід. Допущення справедливо, зокрема, в умовах низхідного потоку вологи в зоні аерації над рівнем ґрунтових вод.

Інтенсивність надходження речовини у водоносний горизонт через шарувату товщу ґрунтів визначається розглянутим далі способом. Спочатку розраховується концентрація на нижній межі верхнього шару «1» без урахування впливу нижнього шару «2». Для цього використовується формула для розрахунку одновимірної нестационарної міграції у напівобмеженій або обмеженій області із заданою на вході концентрацією C_p (див. підрозділ 2.2).

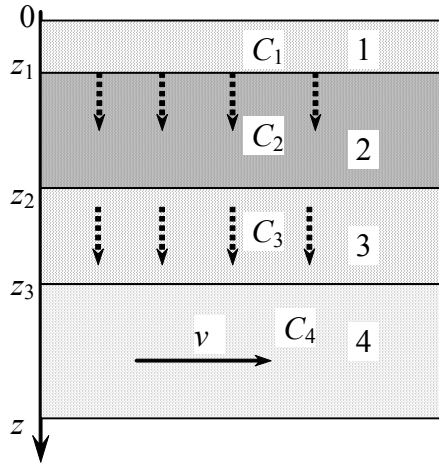
Далі змінна у часі концентрація C_1 на виході з шару «1» розглядається як вхідна на верхній межі шару «2»:

$$C_1(z_1, t) = C_2(z_1, t).$$

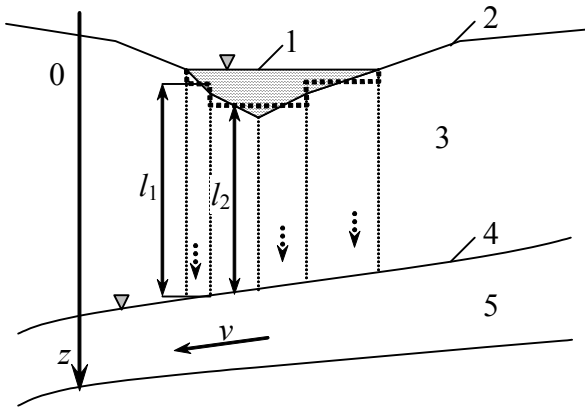
Концентрація C_2 розраховується аналогічно C_1 у межах шару «2» в діапазоні координати $\zeta = z - z_1$, отже, $0 < \zeta < z_2 - z_1$. На межі шарів «2» і «3» задається умова

$$C_2(z_2, t) = C_3(z_2, t),$$

тобто концентрація на виході з шару «2» задається як вхідна на верхній межі шару «3». Інтенсивність надходження речовини до водоносного горизонту визначається за концентрацією на його покрівлі або на виході з шару «3», тобто $C_3(z_3, t)$.



a)



б)

Рис. 1.12. Схематизація вертикального масопереносу:
у шаруватій товщі порід (а), де 1 – шар відходів, що містять розчинні речовини; 2, 3 – шари порід різної проникності; 4 – водоносний горизонт, при змінній потужності зони аерації (б), де 1 – хвостосховище або шар відходів; 2 – поверхня землі; 3 – зона аерації; 4 – рівень ґрунтових вод; 5 – водоносний горизонт

Для врахування змінної в плані потужності зони аерації джерело надходження речовин розбивається на ділянки, в межах яких приймається квазістаціонарний рівень залягання ґрунтових вод (рис. 1.12, б). Різне висотне положення ділянок може бути пов'язано, наприклад, з рельєфом, рівнем дна хвостосховищ, неоднаковим заглибленням поховань відходів, нахилом дзеркала ґрунтових вод тощо. На кожній ділянці низхідна міграція моделюється окремо, аналогічно описаній вище схемі для шаруватої зони аерації.

Питання для самоконтролю

1. Дайте загальну характеристику основних схем неоднорідності ґрунтів.

2. Охарактеризуйте параметри міграції у породах з тріщинно-блоковою структурою.

3. Визначте період застосовності схеми необмеженої ємності для тріщинно-пористої породи з такими параметрами $L_b=0,1\dots0,5$ м, $n=0,15$, $D_m=10^{-5}\dots5\cdot10^{-5}$ м²/добу.

4. Охарактеризуйте відмінності між схемами міграції уздовж проникних шарів. Як розраховуються основні параметри міграції?

5. Опишіть підхід до схематизації переносу перпендикулярно межі поділу шарів.

6. Через які чинники інтенсивність низхідної міграції до ґрунтових вод змінюється у часі й просторі?

Розділ 2

МЕТОДИ МОДЕЛЮВАННЯ МАСОПЕРЕНОСУ В ПІДЗЕМНИХ ВОДАХ

2.1. Модель конвективного переносу вздовж лінії течії

Основні співвідношення. Схеми фільтрації до одиночного водозабору. Основні закономірності зміни якості вод на водозаборах. Уточнення межі поділу прісних і некондиційних вод.

Основні співвідношення. Дану модель, яку ще називають «поршневою», доцільно використовувати для прогнозування міграції за наявності потужних джерел надходження та відбору води (свердловини, водовідстійники тощо), які суттєво змінюють природний потік підземних вод. В умовах високих швидкостей фільтраційного потоку вплив конвекції на міграцію речовин стає більш вагомим порівняно з гідродинамічною дисперсією. Тоді для попередніх оцінок можна знехтувати дисперсією і вважати, що перехідна зона між областями потоку з мінімальною та максимальною концентрацією відсутня (рис. 1.1). Розчинені та зважені речовини мігрують виключно вздовж ліній течії фільтраційного потоку.

Швидкість міграції речовини, що не сорбується, визначається за формулою

$$v_m = \frac{dl}{dt} \frac{v}{n_0}, \quad (2.1)$$

де l – довжина, відлічувана вздовж лінії течії; t – час; v – швидкість фільтрації; n_0 – активна пористість. Горизонтальні компоненти швидкості фільтрації визначаються так:

$$v_x = \frac{\partial \Phi}{\partial x} = -K \frac{\partial H}{\partial x}, \quad v_y = \frac{\partial \Phi}{\partial y} = -K \frac{\partial H}{\partial y}, \quad (2.2)$$

де Φ – потенціал швидкості, $\Phi = -KH$; K – коефіцієнт фільтрації; H – напір. Замість напору можна використовувати його перевищення над певним усталеним рівнем.

Потенціал Φ пов'язаний з функцією течії Ψ співвідношеннями Коші–Рімана

$$\frac{\partial \Phi}{\partial x} = \frac{\partial \Psi}{\partial y}, \quad \frac{\partial \Phi}{\partial y} = -\frac{\partial \Psi}{\partial x}. \quad (2.3)$$

Отже, якщо відомий вираз для напору H або потенціалу Φ , за співвідношеннями (2.3) можна знайти функцію течії Ψ . Лінії рівних потенціалів $\Phi = \text{const}$ та лінії течії $\Psi = \text{const}$ утворюють ортогональну гідродинамічну сітку руху. З точки зору фільтрації функція течії кількісно характеризує витрату потоку аналогічно рис. 1.1.

За формулами (2.1) і (2.2) розраховується нестационарна міграція у стаціонарному фільтраційному потоці, отже, коливання напору у часі не враховуються. Визначені за таким підходом зони впливу водозаборів та відповідні оцінки зон поширення речовин є усередненими.

Приклади розташування свердловин (водозаборів) відносно меж водоносних горизонтів є дуже різноманітними. Відомі схеми [1, 12, 16] описують переважно випадки одиночної свердловини у плоскопаралельному потоці, що змінений відкачуванням води. Такі ситуації характерні для водозаборів поблизу водних об'єктів (річок, водоймищ) або на віддаленості від них, а також у разі перехоплення свердловиною забруднених підземних вод. За наявності декількох свердловин у напірному водоносному горизонті можна підсумовувати потенціали точкового стоку і природної течії підземних вод, що дозволяє отримати аналітичні вирази потенціалу і компонентів швидкості фільтрації для складної течії.

Розглянемо більш детально випадки одиночної свердловини на віддаленості від межі та поблизу межі з рікою. Виокремимо в області потоку смугу, обмежену лініями течії, зі значеннями функції течії на них Ψ_1 та Ψ_2 (рис. 2.1). Витрата підземної води через неї розраховується за формулою

$$Q_{1,2} = (\Psi_2 - \Psi_1)m, \quad (2.4)$$

де m – потужність водоносного горизонту. В області живлення водозабору має виконуватися співвідношення

$$|\Psi| < \frac{Q}{2m}. \quad (2.5)$$

На нейтральній лінії течії $|\Psi| = Q/2m$, на головній – $\Psi = 0$.

У розглянутій схемі ділянка надходження речовини до водоносного горизонту обмежена лініями течії. Тоді концентрація речовини у воді, відкачуваній свердловиною, визначається за правилом змішування

$$C_s = \frac{C_0(Q - Q_{1,2}) + C_p Q_{1,2}}{Q}, \quad (2.6)$$

де C_0 – концентрація речовини у чистій воді; C_p – концентрація речовини на ділянці її надходження до водоносного горизонту; Q – дебіт свердловини.

Схеми фільтрації до одиночного водозабору подані на рис. 2.2. Основні формули наведені у табл. 2.1 – 2.4. Тут позначено: R – радіус впливу свердловини, м; q – питома витрата природного фільтраційного потоку, м²/добу, $q = v m$; r_f та x_f – положення фронту фільтрації речовини на головній лінії течії в момент t_f , r_{f0} та x_0 – початкове положення фронту; d – найкоротший відрізок між свердловиною та межею.

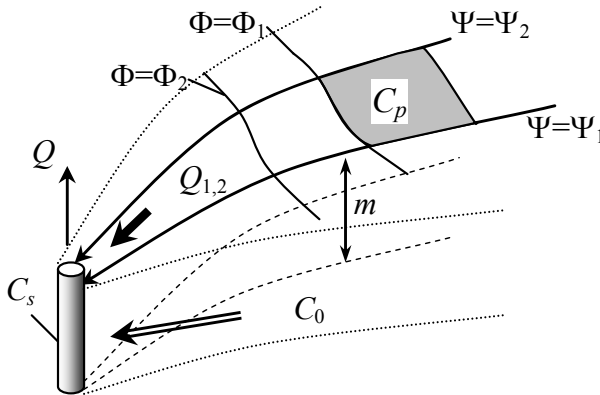
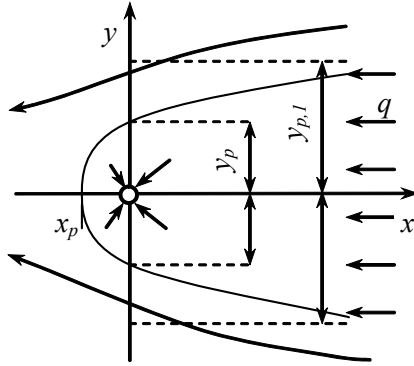
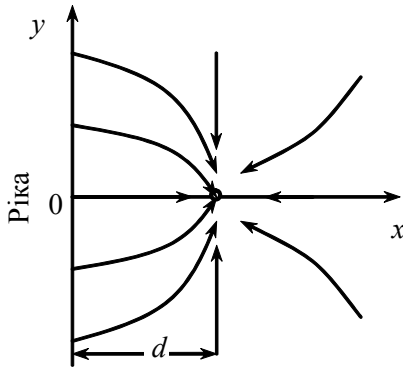


Рис. 2.1. Схема змішування чистих та забруднених вод у свердловині

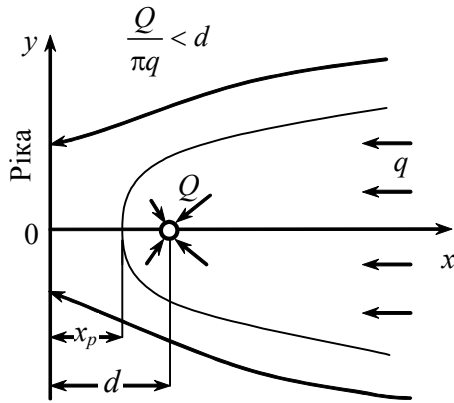


a)

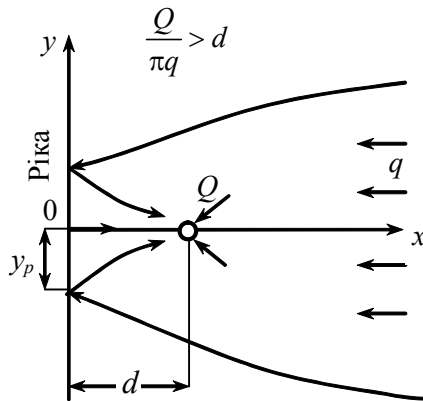


б)

Рис. 2.2. Схеми фільтрації до одиночного водозабору, що розташований:
в потоці з природним градієнтом на віддаленості від ріки (а),
в потоці без природного градієнта поблизу ріки (б)



в)



г)

Рис. 2.2. (Продовження)
Схеми фільтрації до одиночного водозабору, що розташований в потоці з природним градієнтом поблизу ріки (в, г)

За відсутності природного потоку підземних вод (табл. 2.1, 2.3, рис. 2.2, б) область живлення водозабору є необмеженою чи напівобмеженою та охоплює весь водоносний горизонт. Якщо ж природний потік існує, область живлення водозабору стає обмеженою, а її межа визначається так званою «нейтральною» лінією течії. За формулами, наведеними у табл. 2.2 і 2.4, можна визначити координати характерних точок x_p та y_p на цій лінії.

Формули для визначення часу t_f , за який фронт фільтрації переміститься від свого початкового положення x_0 до поточного x_f , наведені лише для головної лінії течії $\Psi = 0$ (тобто для $y = 0$). Розрахований час є заниженим, а швидкість надходження речовин до водозабору – завищеною.

Для обчислення t_f у схемі водозабору на віддаленості від ріки (рис. 2.1, табл. 2.2) слід узяти $x = 0$. Фільтрація забруднених вод до свердловини можлива у зоні, обмеженій нейтральною лінією течії, яка перетинає вісь Ox у «точці застою» з координатою x_p . У схемах фільтрації до берегового водозабору час t_f розраховується при $x = d$.

Таблиця 2.1

Формули для розрахунку фільтрації до водозабору в потоці без природного градієнта течії на віддаленості від ріки

Розрахункові параметри	Формули
Потенціал	$\Phi = -\frac{Q}{2\pi m} \ln \frac{R}{r}$
Функція течії	$\Psi = \frac{Q}{2\pi m} \arctg \frac{y}{x}$
Компоненти швидкості фільтрації	$v_x = -\frac{Q}{2\pi m} \frac{x}{r^2}, \quad v_y = -\frac{Q}{2\pi m} \frac{y}{r^2}$
Час руху речовини на головній лінії течії	$t_f = \frac{\pi m n_0 n_e}{Q} (r_{f,0}^2 - r_f^2)$

Тут прийнято $r = \sqrt{x^2 + y^2}$.

Таблиця 2.2

Формули для розрахунку фільтрації до водозабору
в потоці з природним градієнтом течії на віддаленості від ріки

Розрахункові параметри	Формули
Потенціал	$\Phi = -\frac{Q}{2\pi m} \ln \frac{R}{r} + \frac{q}{m} x$
Функція течії	$\Psi = \begin{cases} \frac{Q}{2\pi m} \operatorname{arctg} \frac{y}{x} + \frac{q}{m} y, & x > 0, \\ \frac{Q}{2\pi m} \left(\pi - \operatorname{arctg} \frac{y}{x} \right) + \frac{q}{m} y, & x < 0 \end{cases}$
Компоненти швидкості фільтрації	$v_x = -\left(\frac{Qx}{2\pi m r^2} + \frac{q}{m} \right), v_y = -\frac{Qy}{2\pi m r^2}$
Координати характерних точок на нейтральній лінії течії	$x_p = -\frac{Q}{2\pi q}$ $y_p _{x=0} = \pm \frac{Q}{4q}, \quad y_{p,1} _{x=\infty} = \pm \frac{Q}{2q}$
Час руху речовини на головній лінії течії	$t_f = \frac{n_e m n}{q} \left(x_0 - x_f - x_p \ln \left \frac{x_f - x_p}{x_0 - x_p} \right \right)$

Тут прийнято $r = \sqrt{(d-x)^2 + y^2}$, $\rho = \sqrt{(d+x)^2 + y^2}$

Таблиця 2.3

Формули для розрахунку фільтрації до водозабору
в потоці без природного градієнта поблизу ріки

Розрахункові параметри	Формули
1	2
Потенціал	$\Phi = -\frac{Q}{2\pi m} \ln \frac{\rho}{r}$

Продовження табл. 2.3

1	2
Функція течії	$\Psi = \begin{cases} \frac{Q}{2\pi m} \left(\arctg \frac{y}{d+x} + \arctg \frac{y}{d-x} \right), & x < d, \\ \frac{Q}{2\pi m} \left(\pi + \arctg \frac{y}{d+x} - \arctg \frac{y}{ d-x } \right), & x > d \end{cases}$
Компоненти швидкості фільтрації	$v_x = -\frac{Q}{2\pi m} \left(\frac{d+x}{\rho^2} + \frac{d-x}{r^2} \right), v_y = -\frac{Q}{2\pi m} \left(\frac{y}{\rho^2} - \frac{y}{r^2} \right)$
Час руху речовини на головній лінії течії	$t_f = \frac{\pi n_e m n}{3Qd} (x_0^3 - x_f^3 + 3d^2(x_f - x_0))$

Тут прийнято $r = \sqrt{(d-x)^2 + y^2}$, $\rho = \sqrt{(d+x)^2 + y^2}$

Таблиця 2.4

Формули для розрахунку фільтрації до водозабору в потоці з природним градієнтом поблизу ріки

Розрахункові параметри	Формули
1	2
Потенціал	$\phi = -\frac{Q}{2\pi m} \ln \frac{\rho}{r} + \frac{q}{m} x$
Функція течії	$\Psi = \begin{cases} \frac{Q}{\pi m} \left(\arctg \frac{y}{d+x} + \arctg \frac{y}{d-x} \right) + \frac{q}{m} y, & x < d, \\ \frac{Q}{\pi m} \left(\pi + \arctg \frac{y}{d+x} - \arctg \frac{y}{ d-x } \right) + \frac{q}{m} y, & x > d \end{cases}$
Компоненти швидкості фільтрації	$v_x = -\frac{Q}{2\pi m} \left(\frac{d+x}{\rho^2} + \frac{d-x}{r^2} \right) - \frac{q}{m},$ $v_y = -\frac{Q}{2\pi m} \left(\frac{y}{\rho^2} - \frac{y}{r^2} \right)$

1	2
Координати характерних точок на нейтральній лінії течії	1) припливу від ріки немає (рис. 2.2, в) $x_p = \sqrt{d \left(d - \frac{Q}{\pi q} \right)}, \quad \frac{Q}{\pi q} < d,$ 2) частковий приплив від ріки (рис. 2.2, г) $y_p = \sqrt{d \left(\frac{Q}{\pi q} - d \right)}, \quad \frac{Q}{\pi q} > d$
Час руху речовини на головній лінії течії	1) припливу від ріки немає (рис. 2.2, в) $t_f = \frac{n_e m n}{q} \left(x_0 - x_f + \frac{d^2 - x_p^2}{2x_p} \ln \left \frac{(x_0 + x_p)(x_f - x_p)}{(x_0 - x_p)(x + x_p)} \right \right),$ $x_0 > x_p,$ 2) частковий приплив від ріки (рис. 2.2, г) $t_f = \frac{n_e m n}{q} \left(x_0 - x_f + \frac{d^2 + y_p^2}{y_p} \left(\arctg \frac{x_f}{y_p} - \arctg \frac{x_0}{y_p} \right) \right);$
Приплив річкових вод до свердловини	$Q_r = \frac{2Q}{\pi q} \arctg \frac{y_p}{d} - 2q y_p$
Приплив підземних вод до свердловини	$Q_{gw} = \frac{2Q}{\pi q} \arctg \frac{d}{y_p} + 2q y_p$

Прийнято $r = \sqrt{(d-x)^2 + y^2}$, $\rho = \sqrt{(d+x)^2 + y^2}$

Формули, наведені у табл. 2.1 – 2.4, справедливі у випадку обмеженої за площею ділянки надходження речовин до водоносного горизонту. Якщо межа, що розділяє зони з чистою та забрудненою водою, являє собою пряму на відстані r_a від свердловини (рис. 2.3), то основні параметри міграції визначаються за такими формулами:

а) положення фронту фільтрації

$$r_f = \sqrt{\frac{r_a^2}{\cos^2 \theta} - \frac{Qt}{\pi n_e m n_0}}, \quad (2.7)$$

б) час міграції речовини до водозабору при $r \ll r_a$

$$t_f \approx \frac{\pi n_e m n_0 r_a^2}{Q \cos^2 \theta}, \quad (2.8)$$

в) приплив забруднених вод до водозабору

$$Q_p = \frac{\theta}{\pi} Q, \quad \theta = \arccos \sqrt{\frac{\pi n_e m n_0 r_a^2}{Qt}}. \quad (2.9)$$

У випадку декількох свердловин слід розрахувати картину течії та визначити смуги, в межах яких мігрує основна маса речовини. Далі за формулами (2.1) і (2.2) розраховується швидкість течії у межах цих смуг, за (1.1) – час міграції, а за формулами (2.4) та (2.6) – приплив води від джерела речовини до свердловин та максимальна концентрація у воді водозабору після змішування.

Результати, отримані на основі описаної «поршневої» схеми (конвективного переносу), слід використовувати для попередніх оцінок, зважаючи на нехтування впливом гідродинамічної дисперсії.

Основні закономірності зміни якості вод на водозаборах. Цей процес зумовлений підтягуванням до водозабору некондиційних вод, як правило, з підвищеною мінералізацією. Її значення при цьому змінюється в інтервалі від C_0 до C_p , а динаміка зміни визначається розташуванням та дебітами свердловин, фільтраційними властивостями порід та геометрією пласта, параметрами природного потоку підземних вод тощо.

Можливі три основні випадки засолення вод на водозаборі: повне, часткове, спадне (рис. 2.4). Повне засолення має місце, наприклад, якщо солоні підземні води розташовані вище за потоком (рис. 2.2, а), а межа, що їх розділяє з прісними водами, повністю перетинає область живлення водозабору. Часткове засолення відбувається у разі розташування свердловини поблизу берега і часткового підтягування некондиційних річкових вод (рис. 2.2, г) або у випадку, коли свердловина розташована поблизу межі поділу прісних та солоних вод відповідно до схеми на рис. 2.3. Тоді

максимально можливе значення мінералізації C_c буде у діапазоні від C_0 до C_p . Спадне засолення може виникнути, коли солоні води знаходяться в області живлення водозабору нижче за потоком відносно свердловини. Тоді після тимчасового зростання мінералізація зменшуватиметься за рахунок заміщення солоних вод прісними, що надходять зверху за потоком.

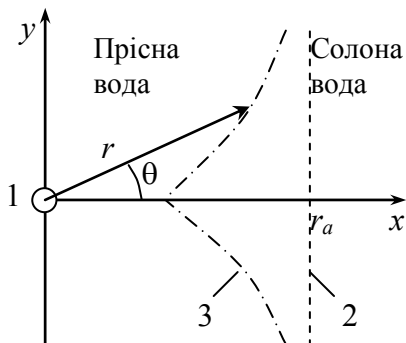


Рис. 2.3. Схема припливу солоних вод від прямолінійного контуру: 1 – свердловина, 2 – початкове положення межі, 3 – положення межі після початку відбору води

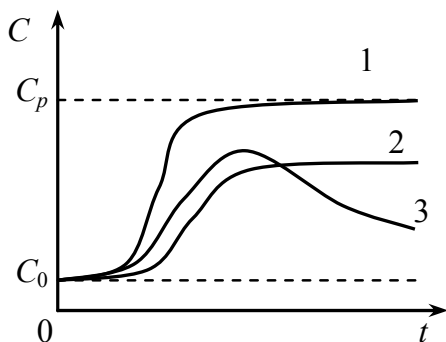


Рис. 2.4. Динаміка засолення водозабору 1 – повного, 2 – часткового, 3 – спадного

Уточнення межі поділу прісних і некондиційних вод. Положення цієї межі може помітно відрізнятись від того, що прогнозується для рідин з однаковою густиною. З точки зору практики важливими вважаються такі задачі: 1) оцінка форми і довжини межі поділу важкої (солоні) і легкої (прісної) рідин; 2) врахування впливу густини розчину, що витікає через днище водовідстійника, на швидкість вертикальної міграції солей; 3) прогноз підтягування до водозабору мінералізованих вод, розташованих нижче від забою свердловини.

Контакт між прісною водою і розчином солей, що надходять у слабопохилий пласт, являє собою певну криву у вертикальному перерізі. В разі значної довжини контакт між рідинами можна вважати прямою похилою лінією (рис. 2.5). Середина контакту близька до положення фронту фільтрації, тобто до межі поділу рідин з однаковою густиною у «поршневій» схемі.

Більш важкі солоні води швидше рухаються у нижній частині пласта, опереджаючи фронт фільтрації; а на покрівлі, навпаки, межа поділу вод відстає від нього. Якщо в пласті мігрує більш легка рідина (наприклад нафтопродукти), то положення межі поділу змінюється: легка рідина швидше рухається біля покрівлі пласта, але відстає від фронту фільтрації у нижній частині.

Довжину межі поділу і швидкість її руху можна визначити за такими наближеними формулами [18]:

$$L_b = A \sqrt{K m \Delta \bar{\gamma} t \frac{\cos \alpha}{n}}, \quad v_b = \frac{q}{nm} - K \Delta \bar{\gamma} \frac{\sin \alpha}{n}, \quad (2.10)$$

де $\Delta \bar{\gamma}$ – додатковий гравітаційний градієнт, зумовлений різницею густини, $\Delta \bar{\gamma} = \frac{\gamma_1 - \gamma_2}{\gamma_2}$, тут γ_1 і γ_2 – питома вага розчину, що

надходить у пласт, та прісної води відповідно, α – кут нахилу пласта до горизонту (інші позначення див. вище), A – числовий коефіцієнт, значення якого, за даними різних авторів, лежать у діапазоні від 1,53 до 2,2 [18]. Зазначимо, що така точність прийнятна для попередніх оцінок довжини контакту L_b , зважаючи на можливий ефект гідродинамічної дисперсії.

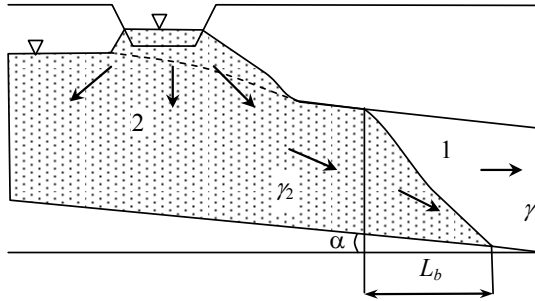


Рис. 2.5. Схема поділу солоних (1) та прісних (2) вод у слабпохилому пласті

З другого виразу (2.10) випливає, що в горизонтальних пластах ($\alpha = 0$) межа поділу рідин рухається зі швидкістю $v_{b,0} = \frac{q}{nm}$, тобто аналогічно витисненню однієї рідини іншою з однаковою густиною. В похилих пластах швидкість руху залежить також від знака $\Delta\bar{\gamma}$ та кута нахилу α . Якщо $\Delta\bar{\gamma}$ та α одного знака, то $v_{b,0} < v_b$, якщо різного – то $v_{b,0} > v_b$.

У разі руху розсолів у вертикальному напрямку ($\alpha = 3\pi/2$, $\sin \alpha = -1$) швидкість фільтрації згідно з (2.10) становитиме

$$v_b = \frac{q}{nm} + \frac{K \Delta\bar{\gamma}}{n}.$$

Таким чином, важкі розсоли з високою мінералізацією фільтруються вниз з більшою швидкістю.

Приклад. Нехай питома вага розсолів 1,01, прісної води 1,0, тоді $\Delta\bar{\gamma} = 0,01$. Якщо коефіцієнт фільтрації дорівнює 10 м/добу, активна пористість – 0,1, то швидкість фільтрації порівняно з рідиною однакової густини збільшиться на 0,1 м/добу. Цей чинник треба враховувати для оцінки контурів зон міграції розсолів на тривалі періоди.

Вплив різної густини мінералізованих вод необхідно враховувати також у разі водовідбору з недовершеної свердловини, нижче забою якої знаходяться більш важкі солоні води (рис. 2.6). Для цієї схеми можна визначити так званий максимальний «безсольовий» дебіт Q_{fm} . При експлуатації свердловини з дебітом $Q < Q_{fm}$ можна взагалі уникнути підтягування солоних вод знизу. Величину Q_{fm} розраховують за формулою

$$Q_{fm} \approx \pi K_1 \Delta\bar{\gamma} \frac{m_f^2 - l_f^2}{\ln(r_c/r_0)}, \quad (2.11)$$

де K_1 – коефіцієнт фільтрації у пласті, що містить прісну воду, m_f – потужність цього пласта, l_f – довжина фільтра в цій зоні, r_c – радіус контуру пласта, r_0 – радіус свердловини.

Час спадання «куполу» солоних вод можна приблизно розрахувати за формулою

$$t_d = \frac{a m_f n}{\Delta\bar{\gamma}} \ln \frac{m_f - z_1}{m_f - z_2}, \quad (2.12)$$

де коефіцієнт a змінюється в діапазоні від 1 до 3.

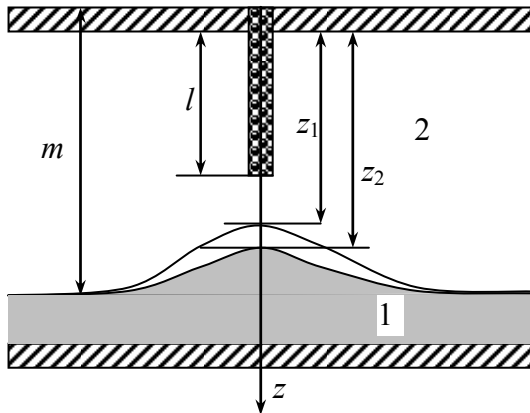


Рис. 2.6. Схема підтягування конуса солоних вод при роботі недовершеної свердловини: 1, 2 – солоні та прісні води відповідно

Нехай потужність зони прісних вод 30 м, довжина фільтра 15 м, коефіцієнт фільтрації 5 м/добу, $r_c = 300$ м, $r_0 = 0,1$ м, $\Delta\bar{\gamma} = 0,02$, пористість 0,1. Якщо дебіт свердловини не перевищуватиме 53 м³/добу, то солоні води не надходитимуть до свердловини. Після припинення відкачки рівень солоних вод опуститься (з 5 до 14 м) нижче забою за проміжок часу, що оцінюється від 173 до 520 діб.

Питання для самоконтролю

1. Як розраховується швидкість фільтрації та витрата течії у разі відомого потенціалу швидкості?
2. Як визначається концентрація речовини у водозаборі за наявності кількох джерел її надходження до водоносного горизонту?
3. Що є спільного та відмінного у схемах фільтрації до водозабору (рис. 2.2): «а» і «в», «б» і «г», «в» і «г»?
4. Якого максимального значення сягне мінералізація у свердловині (схема на рис. 2.3), якщо мінералізація прісних та солоних вод дорівнює 0,1 та 3,5 г/л відповідно?
5. Охарактеризуйте гідрогеологічні умови формування часткового та спадного засолення водозаборів.
6. Охарактеризуйте зміни межі поділу солоних і прісних підземних вод та причини цього.
7. За яких умов швидкість руху межі поділу солоних та прісних вод дорівнюватиме нулю?
8. На скільки відсотків зросте швидкість вертикальної міграції розсолу, якщо його мінералізація збільшиться з 10 до 40 г/л?
9. Визначте максимальний безсольовий дебіт та час спадання «сольового купола» за формулою (2.11) для параметрів, наведених у тексті для мінералізації 30 і 60 г/л та довжини фільтра 20 м.

Задачі

1. Локальне джерело надходження солей до підземних вод (рис. 2.7) обмежується лініями течії, що проходять через точки з координатами (x_1, y_1) та (x_1, y_2) . Мінералізація розчинів у джерелі $C_p = 10$ г/л, мінералізація прісних вод $C_0 = 0,3$ г/л. Швидкість природного потоку підземних вод $v = 0,01$ м/добу, потужність

водоносного горизонту $m = 10$ м, активна пористість $n = 0,3$, дебіт свердловини $Q = 100$ м³/добу, ефективна пористість $n_e = 1,0$.

Розглянути окремо два джерела шириною 40 м, положення яких задається координатами:

1) $x_1=150$ м, $y_1=130$ м, $y_2=170$ м;

2) $x_1=150$ м, $y_1=-20$ м, $y_2=20$ м.

Необхідно виконати такі завдання:

- визначити, чи потрапляють джерела в область живлення водозабору;
- оцінити час підходу фронту солей та мінералізацію у водозабір для обох випадків;
- визначити, для якого джерела мінералізація води у водозаборі буде меншою;
- оцінити, як зміниться час міграції солей на головній лінії течії у разі віддалення джерела на 300 м від свердловини.

Розв'язування. Питома витрата природного потоку підземних вод обчислюється як $q = v m$, отже, $q = 0,1$ м²/добу.

За формулами з табл. 2.2 визначимо координати характерних точок на нейтральній лінії течії:

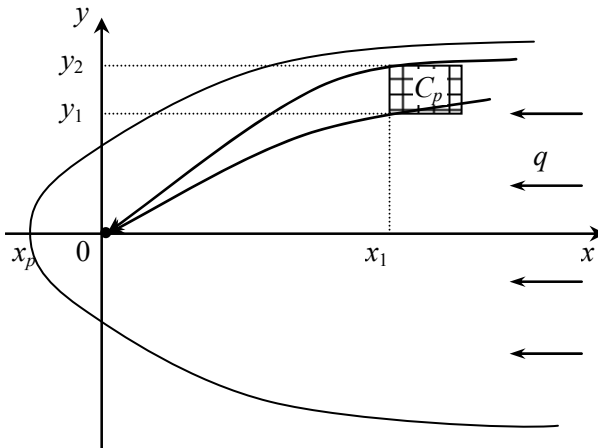


Рис. 2.7. Схема міграції до водозабору від локального джерела надходження речовини у водоносний горизонт

– точка застою нижче по потоку відносно свердловини $x_p = -195,2$ м, $y = 0$;

– точки, що обмежують область живлення на осі Oy : $x = 0$, $y = 250$ м та $x = 0$, $y = -250$ м;

– максимальна ширина області живлення вверх по потоку сягає $500 + 500 = 1000$ м.

З урахуванням умови (2.5) в області живлення має задовольнятися нерівність $|\Psi| < 5$. Значення функції течії в характерних точках становлять:

– для першого джерела

$$\Psi(x_1, y_1) = \frac{100}{2\pi \cdot 10} \operatorname{arctg} \frac{130}{150} + \frac{0,1 \cdot 130}{10} \approx 2,43,$$

$$\Psi(x_1, y_2) = \frac{100}{2\pi \cdot 10} \operatorname{arctg} \frac{170}{150} + \frac{0,1 \cdot 170}{10} \approx 3,05.$$

– для другого

$$\Psi(x_1, y_1) = \frac{100}{2\pi \cdot 10} \operatorname{arctg} \frac{20}{150} + \frac{0,1 \cdot 20}{10} \approx 0,41,$$

$$\Psi(x_1, y_2) = \frac{100}{2\pi \cdot 10} \operatorname{arctg} \frac{-20}{150} + \frac{0,1 \cdot (-20)}{10} \approx -0,41.$$

Як бачимо, всі обчислені значення менші за 5, отже, обидва джерела повністю потрапляють до області живлення водозабору.

Час міграції від першого джерела, що не знаходиться на головній лінії течії, наближено визначається за формулою (1.1). Для цього треба розбити відрізками ділянку лінії течії, що проходить через середину джерела та свердловину, обчислити середні значення на кожному відрізку та виконати чисельне інтегрування. Виконаємо цю процедуру для смуги течії між точками (x_1, y_1) і (x_1, y_2) , не поділяючи її на ділянки.

Отже, лінія течії з'єднує точки з координатами $(0, 0)$ та $(150, 140)$. Середнє значення швидкості визначаємо в точці, близькій до середини цієї кривої – у точці $(75, 70)$:

$$v_x = - \left(\frac{100 \cdot 75}{2\pi \cdot 10 \cdot (75^2 + 70^2)} + \frac{0,1}{10} \right) \approx 0,021 \text{ м/добу},$$

$$v_y = - \frac{100 \cdot 75}{2\pi \cdot 10 \cdot (75^2 + 70^2)} \approx 0,011 \text{ м/добу}.$$

Таким чином, модуль швидкості фільтрації у цій точці становить

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} \approx 0,024 \text{ м/добу.}$$

Мінімальна довжина лінії течії L_t дорівнює довжині відрізка, який поєднує дві граничні точки, отже, $L_t \approx 205,2$ м. Час міграції уздовж цієї лінії оцінюється як $t_f = \frac{L_t n}{v} = \frac{205,2 \cdot 0,2}{0,0237} \approx 1732$ доби (4,75 року).

Приплив мінералізованої води від цього джерела обчислюється за формулою (2.4) $Q_{1,2} = (\Psi_2 - \Psi_1)m = (3,05 - 2,43) \cdot 10 = 6,2$ м³/добу, а середня мінералізація у водозаборі – згідно з (2.6), $C_s = \frac{0,3(100 - 6,2) + 10 \cdot 6,2}{100} \approx 0,9$ г/л.

Час міграції від другого джерела розраховуємо за формулою з табл. 2.2: $t_f = \frac{1 \cdot 10 \cdot 0,2}{0,1} \left(150 - 0 - 159,2 \cdot \ln \left| \frac{0 - 159,2}{150 - 159,2} \right| \right) \approx 886$ діб, тобто 2,43 року. Визначаємо приплив мінералізованої води від цього джерела $Q_{1,2} = (0,41 - (-0,41)) \cdot 10 = 8,2$ м³/добу і середню мінералізацію у водозаборі $C_s = \frac{0,3(100 - 8,2) + 10 \cdot 8,2}{100} \approx 1,1$ г/л.

Отже, мінералізація у водозаборі буде більшою для джерела, розташованого на головній лінії течії, час міграції від нього вдвічі менший.

Оцінимо час міграції у разі відстані джерела 300 м уверх по потоку від свердловини.

Для першого джерела наближено визначимо швидкість фільтрації між точками з координатами (0, 0) та (450, 140) у середній точці (225, 70): $v_x = 0,012$ м/добу, $v_y = 0,002$ м/добу, $v = 0,0126$ м/добу. Мінімальна довжина лінії течії між двома крайніми точками сягає 471 м, отже, $t_f = 7480$ діб $\approx 20,5$ року. Таким чином, час міграції збільшиться у 4,3 раза.

Для другого джерела, що знаходиться на головній лінії течії, час міграції складе

$$t_f = \frac{1 \cdot 10 \cdot 0,2}{0,1} \left(450 - 0 - (-159,2) \ln \left| \frac{0 - (-159,2)}{450 - (-159,2)} \right| \right) \approx 4727 \text{ діб,}$$

тобто 12,95 року, отже, час міграції збільшиться у 5,3 раза.

Для уточнення цих значень треба розбити лінію течії на кілька ділянок і визначити компоненти швидкості та час міграції для кожної з них.

2. Береговий водозабір розташований у водоносному горизонті, де практично відсутній природний потік підземних вод, а свердловина дебітом Q розташована на відстані d від ріки (рис. 2.2, б). Річкові води з мінералізацією $C_p = 1,5$ г/л підтягуються до водозабору. Природна мінералізація підземних вод $C_0 = 0,5$ г/л, пористість водоносного горизонту $n = 0,3$, його потужність $m = 10$ м.

Необхідно визначити:

- приплив річкових вод до свердловини через ділянку берега довжиною $2d$ та $6d$, розташовану симетрично осі Ox ;
- час підтягування річкових вод найкоротшим шляхом;
- час міграції річкових вод до свердловини від точок на березу з координатами $(0, \pm d)$ та $(0, \pm 3d)$;
- мінералізацію відкачуваних вод у ці моменти часу.

Розрахунки провести для двох варіантів розташування водозабору та значення дебіту: 1) $x_0 = 100$ м, $Q = 120$ м³/добу; 2) $x_0 = 150$ м, $Q = 200$ м³/добу.

Розв'язування. Приплив річкових вод на ділянці річки заданої ширини обчислюємо за формулою з табл. 2.3. Розраховуємо функцію течії у граничних точках ділянки шириною $2d$:

$$\Psi(0, 100) = \frac{100}{2\pi \cdot 10} \left(\arctg \frac{100}{100+0} + \arctg \frac{100}{100-0} \right) = 2,5 \text{ м}^2/\text{добу},$$

$$\Psi(0, -100) = -2,5 \text{ м}^2/\text{добу}.$$

Отже, $Q_{1,2} = (\Psi_2 - \Psi_1)m = (2,5 - (-2,5)) \cdot 10 = 50$ м³/добу, тобто половина припливу річкових вод до свердловини проходить через ділянку берега довжиною $2d$. Для ділянки довжиною $6d$

$$\Psi(0, 300) = \frac{100}{2\pi \cdot 10} \left(\arctg \frac{300}{100+0} + \arctg \frac{300}{100-0} \right) = 3,97 \text{ м}^2/\text{добу},$$

$$\Psi(0, -300) = -3,97 \text{ м}^2/\text{добу}.$$

Таким чином,

$$Q_{1,2} = (\Psi_2 - \Psi_1)m = 10 \cdot (3,97 - (-3,97)) = 79,5 \text{ м}^3/\text{добу},$$

тобто близько 80% припливу річкових вод до свердловини проходить через ділянку берега довжиною $6d$.

Час міграції найкоротшим шляхом визначається за формулою для t_f з табл. 2.3, в якій приймається $x_0 = 0$, $x_f = 100$ м. Тоді

$$t_f = \frac{\pi n_e m n}{3Qd} (x_0^3 - x_f^3 + 3d^2(x_f - x_0)) = \\ = \frac{\pi \cdot 10 \cdot 0,3}{3 \cdot 120 \cdot 100} (-100^3 + 3 \cdot 100^3) \approx 524 \text{ доби.}$$

Час міграції від граничних точок ділянок шириною $2d$ і $6d$ визначимо аналогічно тому, як це проведено у розв'язанні попередньої задачі, оцінивши середні швидкості у точках, близьких до середини ліній течії.

Для першої ділянки у точці з координатами (50, 50)

$$v_x = -\frac{100}{2\pi \cdot 10} \left(\frac{100 + 50}{(100 + 50)^2 + 50^2} + \frac{100 - 50}{(100 - 50)^2 + 50^2} \right) \approx 0,032 \text{ м/добу,}$$

$$v_y = -\frac{100}{2\pi \cdot 10} \left(\frac{50}{(100 + 50)^2 + 50^2} - \frac{50}{(100 - 50)^2 + 50^2} \right) \approx -0,028 \text{ м/добу,}$$

а модуль швидкості фільтрації $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} \approx 0,042$ м/добу.

Мінімальна довжина лінії течії дорівнює довжині відрізка між граничною точкою ділянки на березі та водозабором і становить 141,2 м; з урахуванням її кривизни можна прийняти довжину $L_t = 150$ м. Тоді час міграції уздовж неї

$$t = \frac{L_t n_0 n_e}{v} = \frac{150 \cdot 0,3 \cdot 1,0}{0,042} \approx 1071 \text{ доба (2,94 року).}$$

Для другої ділянки у точці з координатами (50, 150)

$$v_x = -\frac{100}{2\pi \cdot 10} \left(\frac{100 + 50}{(100 + 50)^2 + 150^2} + \frac{100 - 50}{(100 - 50)^2 + 150^2} \right) \approx 0,0085 \text{ м/добу,}$$

$$v_y = -\frac{100}{2\pi \cdot 10} \left(\frac{150}{(100 + 50)^2 + 150^2} - \frac{150}{(100 - 50)^2 + 150^2} \right) \approx -0,0042 \text{ м/добу,}$$

а модуль швидкості фільтрації $v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} \approx 0,0095$ м/добу.

Мінімальна довжина лінії течії дорівнює довжині відрізка між граничною точкою ділянки на березі та водозабором і становить 316,2 м; з урахуванням її кривизни можна прийняти довжину $L_t = 320$ м. Тоді час міграції уздовж неї

$$t = \frac{L_t n_0 n_e}{v} = \frac{320 \cdot 0,3 \cdot 1,0}{0,0095} \approx 10105 \text{ діб.}$$

Мінералізація у свердловині обчислюється за формулою (2.6). Для двох ділянок відповідно одержуємо такі значення:

$$C_s = \frac{0,5 \cdot 50 + 1,5 \cdot 50}{100} = 1,0 \text{ г/л, } C_s = \frac{0,5 \cdot 20,5 + 1,5 \cdot 79,5}{100} = 1,3 \text{ г/л.}$$

3. У результаті підтягування річкової води збільшується мінералізація води, відкачуваної береговим водозабором (рис. 2.2, г). Швидкість природного потоку підземних вод $v = 0,01$ м/добу, потужність водоносного горизонту $m = 10$ м, пористість $n = 0,3$. Дебіт свердловини, що розташована на відстані d від берега, позначимо Q . Мінералізація річкових вод $C_r = 2$ г/л, підземних – $C_0 = 0,3$ г/л.

Порівняти якість води у водозаборі та мінімальний час міграції річкових вод до свердловини для двох варіантів її розташування і значення дебіту: 1) $d = 100$ м, $Q = 100$ м³/добу; 2) $d = 150$ м, $Q = 200$ м³/добу.

Розв'язування. Питома витрата природного потоку підземних вод обчислюється як $q = v m$, отже, $q = 0,1$ м²/добу.

Для першого варіанта розташування свердловини та дебіту ширина ділянки припливу річкових вод дорівнює $2 y_p$, де

$$y_p = \sqrt{100 \cdot \left(\frac{100}{\pi \cdot 0,1} - 100 \right)} \approx 147,75 \text{ м.}$$

Приплив річкових та підземних вод визначається за формулами з табл. 2.4:

$$Q_r = \frac{2 \cdot 100}{\pi} \arctg \frac{147,76}{100} - 2 \cdot 0,1 \cdot 147,75 \approx 32,56 \text{ м}^3/\text{добу,}$$

$$Q_{gw} = \frac{2 \cdot 100}{\pi} \arctg \frac{100}{147,76} + 2 \cdot 0,1 \cdot 147,75 \approx 67,44 \text{ м}^3/\text{добу,}$$

отже, середня мінералізація у водозаборі

$$C_s = \frac{0,3 \cdot 67,43 + 2 \cdot 32,57}{100} \approx 0,85 \text{ г/л.}$$

Час підтягування річкової води від берега до свердловини

$$t_f = \frac{0,3}{0,01} \left(\frac{100^2 + 147,75^2}{147,75} \arctg \frac{100}{147,75} - 100 \right) \approx 845,6 \text{ доби.}$$

Для другого варіанта розташування свердловини та дебіту ширина ділянки припливу річкових вод дорівнює $2 y_p$, де $y_p = 270,17$ м. Тоді

$$Q_r = \frac{2 \cdot 200}{\pi} \arctg \frac{270,17}{150} - 2 \cdot 0,1 \cdot 270,17 \approx 81,44 \text{ м}^3/\text{добу},$$

$$Q_{gw} = \frac{2 \cdot 200}{\pi} \arctg \frac{150}{270,17} + 2 \cdot 0,1 \cdot 270,17 \approx 118,56 \text{ м}^3/\text{добу},$$

отже, середня мінералізація у водозаборі C_s буде дорівнювати 0,99 г/л.

Час підтягування річкової води від берега до свердловини обчислюється аналогічно

$$t_f = \frac{0,3}{0,01} \left(\frac{150^2 + 270,17^2}{270,17^2} \arctg \frac{150}{270,17} - 150 \right) \approx 857,6 \text{ доби.}$$

Таким чином, якість води у разі водовідбору за другим варіантом буде дещо гірше, при цьому час міграції річкових вод практично такий самий як у першому варіанті: більша відстань до ріки компенсується потужнішим відбором води.

2.2. Аналітичні залежності на основі моделі гідродинамічної дисперсії

Миттєве та постійно діюче точкове джерело. Площинне та об'ємне джерело. Одновимірна міграція вздовж лінії течії. «Пакетна» схема. Міграція у пористо-тріщинуватих породах. Розрахунок масопотоку за межі області. Визначення параметрів міграції за допомогою експерименту.

Миттєве та постійно діюче точкове джерело. Розрахункова схема точкового джерела є досить поширеною при виконанні

прогнозів міграції речовин у підземних водах. Розглянемо двовимірний у плані плоскопаралельний потік підземних вод. Джерело надходження речовини до водоносного горизонту вважається гідродинамічно пасивним.

Використовуємо двовимірну в плані модель міграції, в якій концентрація речовини в підземних водах усереднена за потужністю водоносного горизонту. У разі миттєвого надходження речовини масою M в момент $t = 0$ у початку координат $(0, 0)$ концентрація C_m у підземних водах розраховується за формулою

$$C_m(x, y, t) = \frac{M}{4\pi m t \sqrt{D_x^* D_y^*}} \exp \left\{ -\lambda t - \frac{(x - v^* t)^2}{4D_x^* t} - \frac{y^2}{4D_y^* t} \right\}, \quad (2.13)$$

де x, y – координати; t – час; v – усереднена швидкість фільтрації, спрямована вздовж осі Ox , $v^* = v/n_e$; λ – константа розпаду речовини або кінетики необоротної сорбції; $D_x^* = D_x/n_e$, $D_y^* = D_y/n_e$, D_x, D_y – коефіцієнти гідродисперсії.

Розрахунки за формулою (2.13) у послідовні моменти часу відтворюють міграцію зони підвищеної концентрації речовини (так званої «плями») у напрямку фільтраційної течії зі швидкістю v^* (рис. 2.8). Максимум концентрації зменшується з часом пропорційно $\exp(-\lambda t)/t$. Збільшення коефіцієнта дифузії прискорює розсіювання «плями» і розмивання її меж, зменшує максимум концентрації. За відсутності розпаду кількість речовини у водоносному горизонті залишається незмінною; у випадку розпаду або необоротної сорбції кількість речовини в розчині зменшується з часом пропорційно $\exp(-\lambda t)$.

Збільшення сорбційної ємності порід відповідає більшим значенням параметра n_e , що в свою чергу зменшує швидкість міграції v^* та скорочує розміри «плями». В реальних умовах розчинна речовина надходить до водоносного горизонту зі зміною в часі інтенсивністю $q(t)$, кг/добу. Концентрація речовини в підземних водах під впливом такого джерела визначається інтегруванням формули (2.5) за часом при $M = 1$:

$$C_p(x, y, t) = \int_0^t q(\tau) C_m(x, y, t - \tau) d\tau. \quad (2.14)$$

У разі сталої інтенсивності джерела $q = \text{const}$ при $\lambda = 0$ формула (2.14) записується у вигляді

$$C_p(x, y, t) = \frac{q}{4\pi m t \sqrt{D_x^* D_y^*}} \exp\left\{\frac{vx}{2D_x}\right\} W(u, \bar{r}), \quad (2.15)$$

де

$$W(u, \bar{r}) = \int_u^\infty \exp\left(-\xi - \frac{\bar{r}^2}{4\xi}\right) \frac{d\xi}{\xi}, \quad (2.16)$$

$$u = \frac{r^2(x, y)}{4D_x t}, \quad \bar{r} = \frac{r(x, y)v}{2D_x}, \quad r(x, y) = \sqrt{x^2 + y^2} \frac{D_x}{D_y}.$$

Функція W табульована у [1], її значення легко обчислюються в системах комп'ютерної математики.

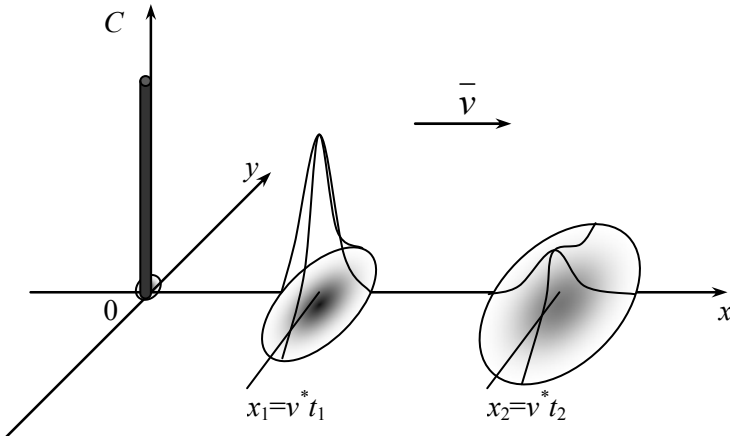


Рис. 2.8. Схематичне зображення міграції речовини після миттєвого викиду в точковому джерелі

На відміну від миттєвого джерела, у цьому разі формується усталена зона поширення речовини (рис. 2.9). Співвідношення параметрів поздовжньої та поперечної дифузії суттєво впливає на форму зони міграції в потоці підземних вод: зі зростанням відношення D_y/D_x збільшується й ширина зони.

Площинне та об'ємне джерело. У випадку постійно діючого площинного прямокутного джерела інтенсивністю $q(t)$ (кг/м²добу) (рис. 2.10) формула для розрахунку концентрації має вигляд

$$C(x,t) = \frac{t}{m_0} \int_0^1 e^{-\lambda t \theta} q_r(t(1-\theta)) C_x(x,\theta) C_y(y,\theta) d\theta, \quad (2.17)$$

де

$$C_x(x,t) = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc}(\xi_{x,1} - \eta_x) - \operatorname{erfc}(\xi_{x,2} - \eta_x) \right\},$$

$$\xi_{1,x} = \frac{x - x_1}{2\sqrt{D_x^* t}}, \quad \xi_{2,x} = \frac{x - x_2}{2\sqrt{D_x^* t}}, \quad \eta_x = \frac{v^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_x^*}}.$$

Вираз для C_y визначається аналогічно до C_x .

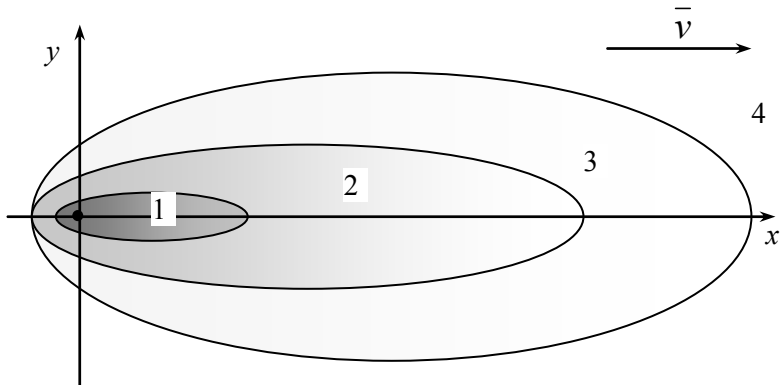


Рис. 2.9. Зона поширення речовини в потоці підземних вод від точкового джерела сталої інтенсивності з утворенням зон: 1 – максимальних концентрацій біля джерела, 2 – перехідної, 3 – периферійної, де концентрація несуттєво перевищує фонові значення, 4 – умовно «чистої»

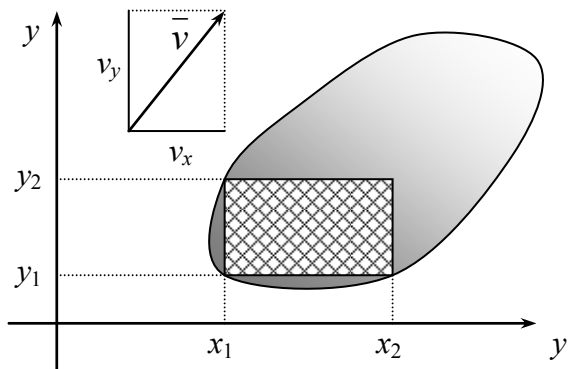


Рис. 2.10. Схема прямокутного постійно діючого джерела у плановому фільтраційному потоці

У випадку джерела зі змінною в часі інтенсивністю надходження речовин до водоносного горизонту розрахункову формулу можна одержати аналогічно формулі (2.17) інтегруванням виразів (2.13) та (2.15) за часом.

Для водоносних горизонтів значної товщини (понад 20 м) практично важливим є розподіл концентрації за їхньою потужністю, тобто уздовж вертикалі. У цьому разі застосовні такі розрахункові схеми:

а) точкове або об'ємне джерело, розташоване безпосередньо у водоносному горизонті;

б) площинне джерело на поверхні (покрівлі) водоносного горизонту.

Випадок а) відповідає нагнітання речовини з невеликим дебітом або розчиненню речовин у результаті вилуговування. Концентрація речовини у підземних водах після миттєвого надходження речовини масою M у водоносний горизонт розраховується за формулою

$$C(x, y, t) = \frac{M}{8\sqrt{(\pi t)^3 D_x^* D_y^* D_z^*}} \exp \left\{ -\lambda t - \frac{(x - v^* t)^2}{4D_x^* t} - \frac{y^2}{4D_y^* t} - \frac{z^2}{4D_z^* t} \right\}. \quad (2.18)$$

У формулі (2.18) не врахований вплив зовнішніх меж фільтраційного потоку, вони вважаються значно віддаленими від джерела та зони міграції.

Після нетривалого закачування рідких відходів вони займають у водоносному горизонті певний об'єм. Приймемо, що початкова концентрація речовини, яка мігрує, становить там C_1 . Від моменту припинення закачування концентрація речовини у підземних водах розраховується за формулою

$$C(x, y, t) = \frac{C_1}{2} e^{-\lambda t} C_x(x, t) C_y(y, t) C_z(z, t), \quad (2.19)$$

де $C_x(x, t)$ визначається так само, як у формулі (2.17), а $C_y(y, t)$ і $C_z(z, t)$ аналогічні $C_x(x, t)$ з відповідною заміною індексів та змінних. У випадку об'ємного джерела зі змінною інтенсивністю в часі концентрація розраховується аналогічно формулі (2.17) шляхом інтегрування за часом.

Випадок б) відповідає надходженню розчинів у результаті вертикальної міграції через зону аерації або порушення верхнього водотривкого шару. Розрахунок міграції у цьому випадку потребує інтегрування за часом [20] і виконується за способом, наведеним далі у цьому розділі.

Взагалі ділянки надходження розчинних речовин мають неправильну форму. Її можна апроксимувати з необхідною детальністю сукупністю прямокутних, лінійних та точкових джерел, сумарна інтенсивність яких еквівалентна інтенсивності джерела. Врахування впливу меж фільтраційного потоку ускладнює розрахункові співвідношення і потребує застосування методів інтегральних перетворень.

Одновимірна міграція вздовж лінії течії. Ця схема широко використовується для попередніх оцінок міграції на основі поля швидкостей фільтрації. Більшість розрахункових формул отримано для спрощених схем плоскопаралельного і радіального потоків.

Для пористих порід (наприклад, для піщаних ґрунтів) застосовна модель гідродинамічної дисперсії. Прогноз міграції на основі цієї моделі враховує розмивання фронту речовини з часом.

Досить поширеним випадком є міграція вздовж лінії течії, на вхідній межі якої ($x = 0$) підтримується стала концентрація C_1 , тоді як уздовж усієї лінії в перший момент часу задана мала фонова

концентрація речовини C_0 . За відсутності розпаду речовини ($\lambda = 0$) або її необоротної сорбції концентрація вздовж лінії течії розраховується за формулою [3, 4, 19]

$$C(x, t) = C_0 + \frac{C_1 - C_0}{2} \left\{ \operatorname{erfc}(\xi_x - \eta_x) + \exp(4\xi_x \eta_x) \operatorname{erfc}(\xi_x + \eta_x) \right\}, \quad (2.20)$$

де

$$\xi_x = \frac{x}{2\sqrt{D_x^* t}}, \quad \eta_x = \frac{v^* \sqrt{t}}{2\sqrt{D_x^*}}.$$

Кількісний аналіз показує, що у разі $(D/vx) < 0,005$ другий доданок з похибкою 4 % можна відкинути. Координата точки з концентрацією $0,5 C_1$ рухається з постійною швидкістю v^* , що відповідає схемі поршневого витиснення. При русі фронту забруднення утворюються три зони (рис. 2.11, а): 1) високих концентрацій, близьких до C_1 ; 2) змішування, де концентрація змінюється від 0 до C_1 ; 3) умовно «чиста», де $C \approx C_0$. Ширина зони змішування L_s між точками з концентрацією $C_0 + 0,99 C_1$ і $C_0 + 0,01 C_1$ оцінюється виразом $6,6 \sqrt{D_x^* t}$, з якого випливає, що L_s з часом збільшується.

У разі розпаду чи необоротної сорбції розрахункова формула має вигляд [4]

$$C(x, t) = C_0 + \frac{C_1 - C_0}{2} \left\{ e^{\frac{x(v-\mu)}{2D_x}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x - \mu t}{2\sqrt{D_x^* t}} \right) + e^{\frac{x(v+\mu)}{2D_x}} \operatorname{erfc} \left(\frac{x + \mu t}{2\sqrt{D_x^* t}} \right) \right\}, \quad (2.21)$$

де $\mu = \sqrt{(v_x^*)^2 + 4D_x^* \lambda}$, де тут λ – параметр розпаду чи сорбції, $\lambda > 0$.

Змінна у часі концентрації на вхідній межі може бути апроксимована стрибкоподібними змінами, причому після кожної зміни концентрацію можна вважати сталою. Тоді концентрація уздовж лінії течії може бути у першому наближенні розрахована як сума концентрацій, обчислених за формулою (2.20) або (2.21):

$$C(x,t) = \sum_{i=1}^N (C(x,t-t_i) - C(x,t-t_{i-1})), \quad (2.22)$$

де t_i – моменти зміни концентрації на вхідній межі з C_{i-1} на C_i .

«Пакетна» схема. У разі надходження розчиненої речовини до водоносного горизонту зі сталою концентрацією протягом певного проміжку часу («пакетне» надходження) концентрація уздовж лінії течії може бути розрахована за формулою [18]

$$C(x,t) = C_0 + \frac{C_1 - C_0}{2} e^{-\lambda t} \left\{ \operatorname{erfc}(\xi_x - \eta_x) - \operatorname{erfc}(\xi_{x,p} - \eta_{x,p}) \right\}, \quad (2.23)$$

де

$$\xi_{x,p} = \frac{x}{2\sqrt{D_x^*(t-t_p)}}, \quad \eta_{x,p} = \frac{v^* \sqrt{t-t_p}}{2\sqrt{D_x^*}},$$

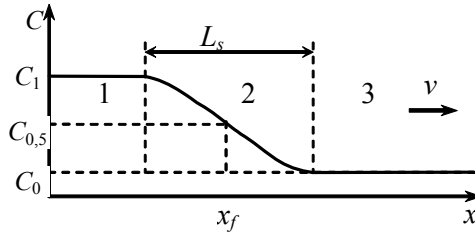
t_p – тривалість надходження речовини до водоносного горизонту (тривалість надходження «пакета»), інші позначення аналогічні попереднім.

Унаслідок конвективної дифузії обидві межі «пакету» розмиваються. Тому його довжина x_p , яка спочатку дорівнює $v^* t_p$, з часом збільшується, а максимальна концентрація зменшується. З часом концентрація речовини в «пакеті» зменшується в результаті гідродинамічної дисперсії навіть за відсутності розпаду. Фронт фільтрації проходить приблизно через середину «пакета», а його положення та концентрація на ньому визначається за формулами

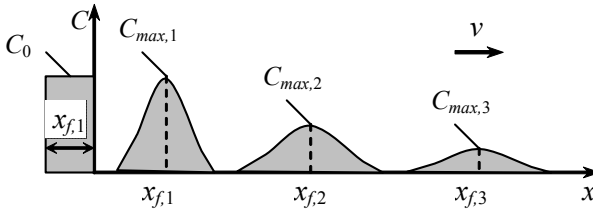
$$x_f = v^* t - 0,5 x_p, \quad C_{0,5} = \frac{C_1 + C_0}{2},$$

які справедливі для моментів часу $t > 15 t_p$.

Для розрахунку концентрації при міграції речовин у тріщинуватих водоносних горизонтах мають використовуватись інші залежності, що характеризують динаміку конвективного переносу по тріщинах і дифузійного переносу в блоках, а також кінетику масообміну між порами та блоками.



а)



б)

Рис. 2.11. Розподіл концентрації вздовж лінії течії фільтраційного потоку в умовах конвективної дифузії та сталої концентрації на вхідній межі (а) і при «пакетному» надходженні на окремій ділянці (б)

Міграція у пористо-тріщинуватих породах. У цьому разі можна нехтувати впливом гідродисперсії в окремому каналі чи прошарку, вважаючи основним механізмом міграції конвективний перенос. Втрата речовини на шляху міграції буде зумовлена молекулярною дифузією за межі каналу в породи з необмеженою сорбційною ємністю.

Розглянемо схему міграції розчинної речовини в проникному прошарку чи каналі (рис. 1.11). Вважається, що міграція відбувається переважно за рахунок конвекції, а молекулярна дифузія проявляється тільки на верхній та нижній межах прошарку. На вхідній межі $x = 0$ задається стала концентрація C_1 , при $t = 0$ в області міграції задається початкова концентрація $C = C_0$. Тоді формула для розрахунку концентрації в області потоку ($x > 0$) записується у вигляді [14]

$$C(x, z, t) = \begin{cases} C_0 + (C_1 - C_0) \operatorname{erfc} \left(\frac{z+x}{2m_1 v} \sqrt{\frac{n_1 D_m}{t - n_1 x/v}} \right), & t > n_1 x/v, \\ C_0, & t < n_1 x/v, \end{cases} \quad (2.24)$$

де z – вертикальна координата; v – швидкість течії в прошарку; m_1 та n_1 – потужність та пористість прошарку. Розрахунки за формулою (2.24) вказують на суттєву відмінність від профілю концентрації, отриманому за схемою конвективної дифузії при $z=0$ (рис. 2.12): область з максимальною концентрацією формується лише біля вхідної межі, практично всю область міграції, що поширюється з часом, можна вважати перехідною. Це пояснюється молекулярною дифузійною за межі шару: чим більша зона міграції, тим більший відтік речовини за межі прошарку.

В умовах порівняно високих швидкостей течії в тріщинах слід враховувати нерівноважний характер масообміну. Для порід, структура яких показана на рис. 1.10, за умови дуже малої гідродисперсії концентрація в області $x > 0$ розраховується за формулою [4]

$$C(x,t) = \begin{cases} C_0 + (C_1 - C_0) \left\{ 1 - e^{-\tau} \int_0^{\eta} e^{-z} I_0(2\sqrt{\tau z}) dz \right\}, & t > nx/v, \\ C_0, & t < nx/v, \end{cases} \quad (2.25)$$

де

$$\eta = \frac{\alpha x}{v}, \quad \tau = \alpha n_e \left(t - \frac{nx}{v} \right),$$

α – параметр кінетики масообміну між тріщинами та порами (див. підрозділ 1.1), інші позначення аналогічні попереднім.

При міграції у таких породах спочатку формується чітка межа, що розділяє «чисту» та «забруднену» зони (рис. 2.13). З часом ця межа просувається за потоком, при цьому перепад концентрацій зменшується. Через певний час, коли встановилася сорбційна рівновага, формується перехідна зона, близька до тієї, що описується моделлю гідродинамічної дисперсії.

Масопотік за межі області міграції у поверхневій водоймищі та водотоки може бути розрахований на основі виразів (1.10). Найбільш поширені межі на виході з області міграції (рис. 1.6):

1) прямий контакт підземних та поверхневих вод, де водоносний горизонт розвантажується у річку або водоймище,

2) витікання підземних вод вище рівня поверхневих.

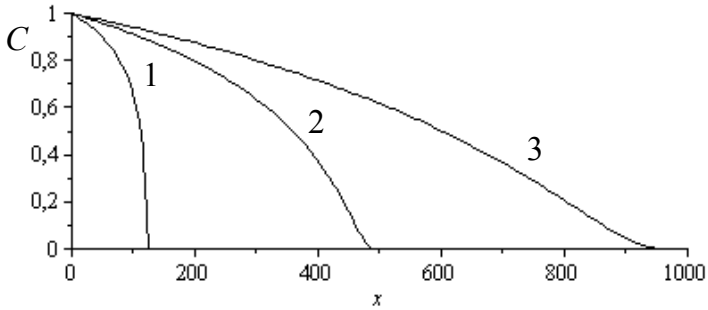


Рис. 2.12. Профілі концентрації при міграції у проникному каналі в послідовні моменти часу t_1 , t_2 та t_3 (1, 2, 3 відповідно) згідно з розрахунком за формулою (2.24)

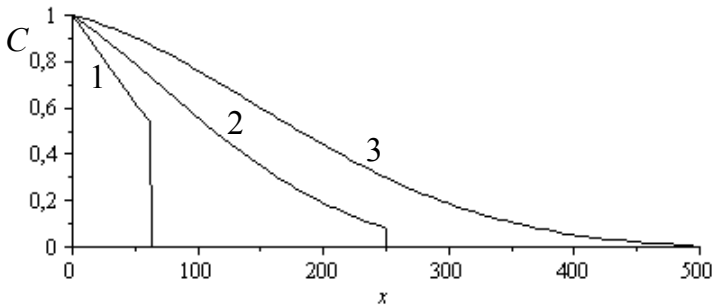


Рис. 2.13. Профілі концентрації при міграції у тріщинуватих породах в послідовні моменти часу t_1 , t_2 та t_3 (1, 2, 3 відповідно) згідно з розрахунком за формулою (2.25)

Питомий масопотік (кг/м²добу) на вихідній межі лінії течії розраховується за формулою

$$q = a v C_{\Gamma}, \tag{2.26}$$

де $a=2$ для випадку 1), $a=1$ для випадку 2); C_{Γ} – значення концентрації у підземних водах на межі. Формули для розрахунку C_{Γ} у разі джерел надходження речовини зверху у водоносний горизонт [20] потребують чисельного інтегрування. Тому для попередніх оцінок можна використовувати вираз (2.26) з коефіцієнтом a в

діапазоні від 1 до 2, а концентрацію C_T на межі обчислювати за формулами розрахунку концентрації для напівобмеженої лінії течії (2.20), (2.21), (2.24), (2.25), зважаючи на відстань між джерелом надходження речовин та вихідною межею.

Визначення параметрів міграції за допомогою експерименту. Для оцінки параметрів міграції широко використовуються моделі, розроблені на основі теорії гідродинамічної дисперсії. В лабораторних умовах частіше застосовують одновимірну модель міграції [5]. Відповідно до схеми на рис. 2.14, на вхід до фільтраційної колонки безперервно подається індикатор зі сталою концентрацією C_1 . В колонці довжиною l_c підтримується усталена швидкість фільтрації v . У певні моменти часу t_i ($i=1, \dots, N$) після початку досліду на виході з колонки відбираються проби розчину, визначається концентрація в них C_i і будується крива зі значеннями $\bar{C}_{\text{exp},i} = C_i/C_1$ залежно від часу t . Задається нульова початкова концентрація.

Відносна концентрація на виході з колонки може бути розрахована за формулою

$$\bar{C}(t) = \frac{1}{2} \operatorname{erfc} \left(\frac{l_c - v^* t}{2\sqrt{D^* t}} \right), \quad (2.27)$$

де l_c – довжина колонки. Позначимо

$$\xi = \frac{l_c - v^* t}{2\sqrt{D^* t}}.$$

Тоді (2.27) можна записати у вигляді

$$\xi = \operatorname{erf}^{-1}(1 - 2\bar{C}), \quad (2.27a)$$

де erf – функція помилок Гауса. Перейдемо до лінійного співвідношення

$$S(t) = B - At, \quad (2.28)$$

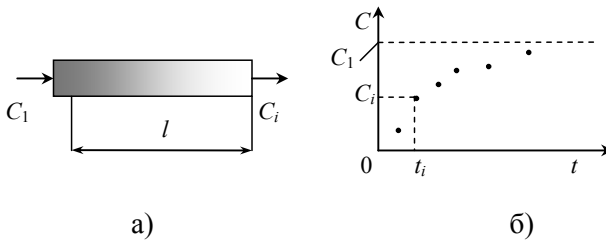
тут $A = \frac{v^*}{2\sqrt{D^*}}$, $B = \frac{l_c}{2\sqrt{D^*}}$, $S(t) = \xi\sqrt{t}$.

У певний момент часу $t = t_0$ має бути $S(t_0) = 0$. З виразу $S(t_0) = 0$ знайдемо ефективну пористість n_e

$$\frac{l_c}{2\sqrt{D^*}} - \frac{v^*}{2\sqrt{D^*}} t_0 = 0, \quad n_e = \frac{vt_0}{l_c}. \quad (2.29)$$

У разі декількох значень вихідної концентрації будуюмо лінію регресії результатів експерименту, визначаємо точки її перетину з осями t та S , обчислюємо t_0 , звідки знаходимо n_e та B (рис. 2.15). За відомого значення B розраховуємо параметр гідродисперсії

$$D = \frac{l_c^2 n_e}{4B^2}. \quad (2.30)$$



а) б)
Рис. 2.14. Схема міграції (а) та зображення результату експерименту (б)

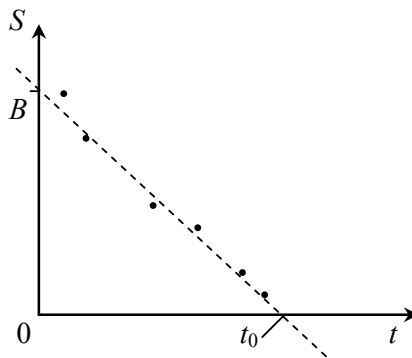


Рис. 2.15. Побудова лінії регресії на основі експерименту

Питання для самоконтролю

1. Як змінюється зона поширення речовини з часом для миттєвого і постійно діючого джерел?
2. Як враховується змінна у часі інтенсивність і форма джерел надходження речовини у водоносний горизонт?
3. Охарактеризуйте відмінності між схемами міграції у водоносних горизонтах значної товщини.
4. Чим відрізняються профілі концентрації уздовж лінії течії, розраховані для пористих та пористо-тріщинуватих порід?
5. Наведіть приклади «пакетних» схем надходження речовин до підземних вод та змінної концентрації на вхідній межі області міграції.

Задачі

1. Визначити профіль концентрації речовини вздовж лінії течії на основі схеми конвективної дифузії для двох моментів часу: t_1 і t_2 . Середня швидкість фільтрації $v = 0,03$ м/добу, параметр дисперсивності $\delta_L = 0,2$ м, параметр ефективної пористості $n_e = 0,9$, $t_1 = 5$ років, $t_2 = 15$ років.

Розв'язування. Проведемо розрахунки спочатку для моменту часу $t_1 = 5$ років = 1825 діб.

Обчислимо положення фронту міграції, де концентрація дорівнює $(C_0 + C_1)/2$:

$$x_f(t_1) = vt_1 / n_e = 0,03 \cdot 1825 / 0,9 \approx 60,8 \text{ м.}$$

Довжина перехідної зони визначається за формулою $L_s = 6,6\sqrt{D_x^* t}$, причому $D = v \delta_L$, тоді $D = 0,006$ м²/добу і $L_s = 23$ м. Середина перехідної зони збігається з положенням фронту міграції, тому граничні точки мають координати $x_f \pm L_s / 2$.

Таким чином, перехідна зона в момент часу t_1 знаходиться між точками з координатами 49,3 та 72,3 м. Виходячи з цього, креслимо профіль концентрації уздовж лінії течії, використовуючи значення функції $\operatorname{erfc}(x)$ [1].

2. Визначити параметри гідродисперсії та сорбції на основі таких експериментальних даних: швидкість фільтрації $6 \cdot 10^{-5} \text{ м/с} = 3,6 \cdot 10^{-3} \text{ м/хв}$ (близько 5 м/добу), через 20 хвилин відносна концентрація на виході з трубки довжиною 0,5 м дорівнювала 0,1, через 60 хв – 0,4.

Розв'язування. Обчислимо значення S_1 та S_2 у моменти часу t_1 і t_2 . У разі лише двох результатів спостережень вони визначаються з рівняння прямої, яка проходить через точки (t_1, S_1) та (t_2, S_2) .

Отже, згідно із формулами (2.27, а) і (2.28)

$$S_1 = \sqrt{20} \operatorname{erf}^{-1}(1 - 2 \cdot 0,1) = 4,47 \cdot 0,9 \approx 4,02;$$

$$S_2 = \sqrt{60} \operatorname{erf}^{-1}(1 - 2 \cdot 0,4) = 7,75 \cdot 0,18 \approx 1,4.$$

$$S = 4,02 + \frac{1,4 - 4,02}{60 - 20}(t - 20) = -0,0655 t + 5,33.$$

З рівняння $S = 0$, тобто

$$-0,0655 t_0 + 5,33 = 0$$

знаходимо t_0 ; $t_0 = 81,37$ хв, тоді n_e визначається з формули (2.29)

$$n_e = \frac{81,37 \cdot 3,6 \cdot 10^{-3}}{0,5} \approx 0,59.$$

При $t = 0$ маємо $B = 5,33$, тому за (2.30) обчислимо

$$D = \frac{0,59 \cdot 0,5^2}{4 \cdot 5,33^2} \approx 1,29 \cdot 10^{-3} \frac{\text{м}^2}{\text{хв}} = 1,86 \frac{\text{м}^2}{\text{добу}}.$$

2.3. Скінченнорізницева планова модель геоміграції

Апроксимація області міграції. Баланс маси в розрахунковому блоці сітки. Розв'язування системи різницевих рівнянь. Умови застосування різницевих схем. Межові умови.

Обмежені можливості аналітичних методів зумовили широке розповсюдження в гідрогеологічній практиці чисельних моделей. Далі викладена двовимірна планова чисельна модель нестационарної геоміграції, в якій використовується метод скінченних різниць.

Апроксимація області міграції. Розглядається плановий фільтраційний потік на слабопохилому водотривкому шарі, коли застосовні припущення гідравлічної теорії фільтрації [2, 3, 10, 14]. Згідно з нею можна усереднити напір уздовж вертикалі за потужністю водоносного шару, при цьому швидкість фільтрації не залежить від вертикальної координати. Вважається, що концентрацію речовини можна також усереднити вздовж вертикалі, тобто в такій моделі концентрація не залежить від координати z .

Область міграції покривається прямими, паралельними осям координат Ox та Oy (рис. 2.16). Прямокутники, створені перетином прямих, називаються блоками сітки, а їхні центри – вузлами сітки. Серед вузлів і відповідних блоків виділяють внутрішні, в яких усі «сусіди» належать області, та граничні, у яких хоча б один сусідній знаходиться за межами області.

Відстані між паралельними гранями блоків називаються кроками сітки

$$\Delta x_i = x_i - x_{i-1}, \quad \Delta y_j = y_j - y_{j-1}, \quad i=1, \dots, N, j=1, \dots, M;$$

де x_i та y_j – координати граней блоків.

Вертикальний розмір блоку дорівнює потужності водоносного шару. Отже, геометрично водоносний горизонт являє собою сукупність паралелепіпедів різної висоти, ширини та довжини, що торкаються сусідніх блоків боковими гранями. Всі параметри моделі визначаються лише у вузлах сітки, і ці значення приписуються всьому блоку. Незважаючи на таке спрощення, модель дозволяє відтворювати складну структуру та форму області, змінюючи параметри у різних вузлах сітки, а також розміри блоків [9, 12, 14].

Подрібнення сітки доцільно в зонах різкої зміни властивостей порід та швидкості фільтрації; у відносно однорідних зонах можна використовувати більші кроки сітки. Чим менші кроки сітки, тим детальнішою є модель. Разом з тим слід уникати надмірного збільшення кількості вузлів, оскільки це ускладнює розрахунок з точки зору отримання стабільного результату, а також часто не може бути забезпечено вхідними даними з потрібною деталізацією.

Увесь проміжок часу τ ділиться інтервалами (часовими кроками) тривалістю Δt_k так, що

$$\Delta t_k = t_k - t_{k-1}, \quad k=1, \dots, Z, \quad t_0=0, \quad t_Z = \tau.$$

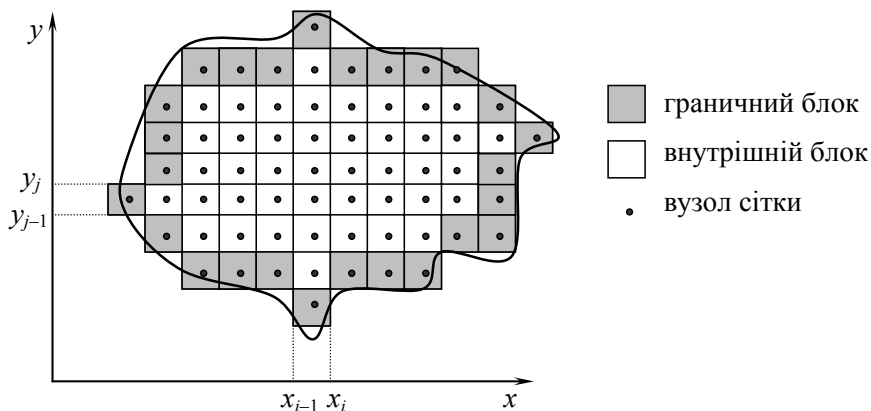


Рис. 2.16. Схема скінченнорізницевої апроксимації області

Всі значення розрахованих величин та параметрів у фіксований момент часу називаються часовим шаром.

Міграційна схематизація має проводитися на основі фільтраційної, тобто з використанням сітки, вже побудованої для моделювання геофільтрації.

Баланс маси в розрахунковому блоці сітки. Розглянемо довільний блок сітки, позначивши його індексом «0», а «сусідів» – індексами «1», «2», «3», «4» (рис. 2.17). Напори (рівні) підземних вод у блоках позначимо через H_0, H_1, H_2, H_3, H_4 , коефіцієнти фільтрації – K_0, K_1, K_2, K_3, K_4 , товщини водоносного горизонту – m_0, m_1, m_2, m_3, m_4 , концентрацію речовини у поровому розчині C_0, C_1, C_2, C_3, C_4 , розміри всіх блоків у плані – Δx та Δy .

Швидкість фільтрації будемо визначати на гранях блоків, тобто на грані між лівим та центральним блоками

$$v_{1,0} = -K_{1,0} \frac{H_0 - H_1}{\Delta x}. \quad (2.31)$$

На інших гранях швидкість визначається аналогічно, але з урахуванням напрямку фільтрації.

Коефіцієнт конвективної дифузії (гідродинамічної дисперсії) згідно з формулою (1.2) пропорційний швидкості фільтрації, тому

$$D_{i,0} = \delta v_{i,0}, \quad i=1, \dots, 4.$$

Відповідно до співвідношень (1.10), потік маси речовини з лівого блоку з індексом «1» до центрального блоку з індексом «0» у різницевому вигляді записується так:

$$q_{1,0} = F_{1,0} \left(v_{1,0} C_1 - D_{1,0} \frac{C_0 - C_1}{\Delta x} \right), \quad (2.32)$$

де $F_{1,0}$ – площа грані між блоками «0» та «1», $F_{1,0} = \Delta y m_{1,0}$, тут $m_{1,0}$ – усереднена товщина водоносного горизонту між цими блоками.

Аналогічно формулі (2.32) визначаються потоки маси з блоку «2» до центрального блоку та з нього до блоків «3» і «4»:

$$q_{2,0} = F_{2,0} \left(v_{2,0} C_2 - D_{2,0} \frac{C_0 - C_2}{\Delta y} \right), \quad (2.33)$$

$$q_{0,3} = F_{3,0} \left(v_{3,0} C_0 - D_{3,0} \frac{C_3 - C_0}{\Delta x} \right), \quad (2.34)$$

$$q_{0,4} = F_{4,0} \left(v_{4,0} C_0 - D_{4,0} \frac{C_4 - C_0}{\Delta y} \right). \quad (2.35)$$

Потік маси до центрального блоку з водою, що фільтрується зверху через зону аерації або водотривкий шар, визначається за формулою

$$q_{v,1} = q_u \Delta x \Delta y, \quad (2.36)$$

де питомий масопотік q_u без урахування вертикальної дифузії наближено розраховується як $q_u = w C_u$; тут w – інфільтрація, C_u – концентрація речовини в цій воді.

Потік маси з центрального блоку з водою, що фільтрується вниз через водотривкий шар, визначається як

$$q_{v,2} = C_0 w_2 \Delta x \Delta y, \quad (2.37)$$

де w_2 – швидкість фільтрації через водотривкий шар.

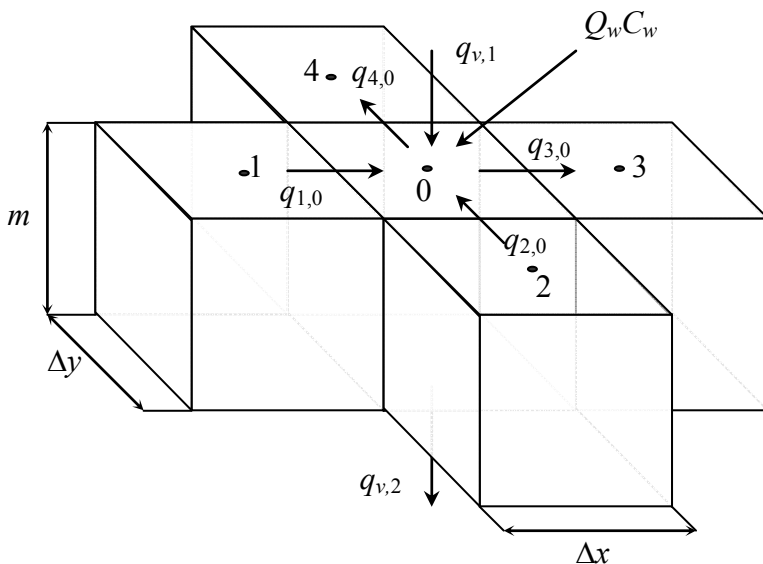


Рис. 2.17. Схема до балансу підземних вод у блоці скінченнорізницевої сітки

Зменшення маси речовини в центральному блоці в розчині за рахунок розпаду та необоротної сорбції визначається за формулою

$$q_R = \lambda C_0 \Delta x \Delta y m_0 n. \quad (2.38)$$

У разі роботи свердловини дебітом Q_w у центральному блоці до складових балансу слід додати масопотік q_w , який дорівнює $C_w Q_w$ при нагнітанні води з концентрацією речовини в ній C_w та $-C_0 Q_w$ при її відкачуванні.

Отже, рівняння балансу маси в блоці скінченнорізницевої сітки на проміжку часу Δt_k записується у вигляді

$$q_{1,0} + q_{2,0} - q_{0,3} - q_{0,4} + q_{v,1} - q_{v,2} - q_R + q_w = n \Delta x \Delta y m_0 \frac{C_0^{(k)} - C_0^{(k-1)}}{\Delta t_k}. \quad (2.39)$$

Всі члени рівняння (2.39) мають однакову розмірність масової витрати – кг/добу. У разі врахування рівноважної оборотної сорбції,

що описується ізотермою Генрі (1.5), замість пористості n використовується ефективна пористість $n_e = n + \bar{K}d$. У рівнянні (2.39) через k позначено індекс часового шару.

Підставивши (2.32) – (2.38) до рівняння (2.39) і зменшуючи розміри блоку до нескінченно малих величин ($\Delta x \rightarrow 0$, $\Delta y \rightarrow 0$), при $\Delta t \rightarrow 0$ перейдемо від різницевих відношень до похідних. Тоді рівняння балансу маси запишеться у вигляді (1.16).

Розв'язування системи різницевих рівнянь. Алгоритм розрахунку нестационарної міграції полягає у послідовному визначенні концентрації на наступному часовому шарі при $t = t_k$, виходячи з відомих значень C на поточному часовому шарі при $t = t_{k-1}$. Розроблено декілька схем такого розрахунку, які відрізняються способами апроксимації похідної за часом у рівнянні (1.16). Найбільш відомі з них називають явною та неявною схемами (рис. 2.18).

Фактично ці схеми відрізняються тим, на якому часовому шарі визначаються потоки маси речовини $q_{1,0}$, $q_{2,0}$, $q_{0,3}$, $q_{0,4}$, $q_{v,1}$, $q_{v,2}$, q_R та q_w . Якщо вони обчислюються на поточному часовому шарі при $t = t_{k-1}$, то після підстановки виразів (2.32) – (2.38) до (2.39) та зведення подібних отримаємо рівняння явної схеми, яке пов'язує значення концентрації в п'яти блоках сітки

$$AC_1^{(k-1)} + BC_2^{(k-1)} + DC_0^{(k-1)} + EC_3^{(k-1)} + GC_4^{(k-1)} + q_{v,\Sigma}^{(k-1)} = FC_0^{(k)}, \quad (2.40)$$

де коефіцієнти A , B , D , E , G та F залежать від кроків сітки, часу та параметрів міграції, індекси « $k-1$ » та « k » позначають часовий шар, доданок $q_{v,\Sigma}^{(k-1)}$ підсумовує потоки маси до блоку та її зменшення за рахунок вертикальної міграції через водотривкі шари, водовідбору та нагнітання води, а також розпаду чи необоротної сорбції.

Якщо ж потоки до центрального блоку та витрата з нього обчислюються на наступному часовому шарі при $t = t_k$, то після підстановки виразів (2.32) – (2.38) до (2.39) і зведення подібних отримаємо рівняння такого вигляду.

$$A'C_1^{(k)} + B''C_2^{(k)} + D'C_0^{(k)} + E'C_3^{(k)} + G'C_4^{(k)} + q_{v,\Sigma}^{(k)} = F'C_0^{(k-1)}, \quad (2.41)$$

де коефіцієнти зі штрихом відмінні від аналогічних у рівнянні (2.40).

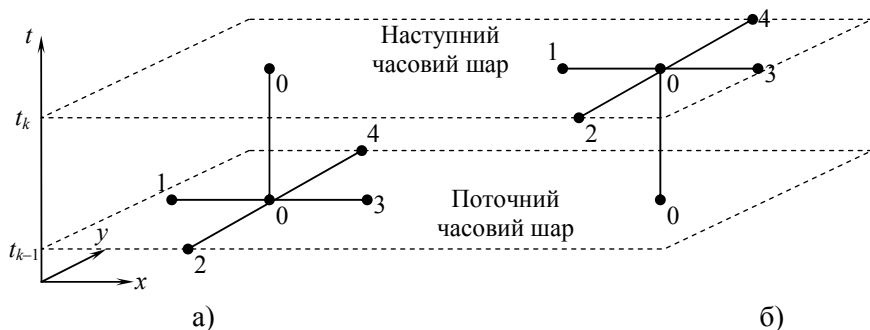


Рис. 2.18. Шаблони явної (а) та неявної (б) схем розрахунку концентрації методом скінченних різниць

Використовуючи явну схему (2.40), можна безпосередньо обчислити концентрацію в центральному блоці у наступний момент часу. Для неявної схеми (2.41) необхідно розв'язувати систему алгебраїчних рівнянь, невідомими в якій є значення концентрації в наступний момент часу в усіх блоках, крім тих, де величина C однозначно задана.

Рівняння (2.40) та (2.41) розв'язуються послідовно для всіх часових шарів від $t = t_0$ до $t = \tau$, причому кожний раз наступний часовий шар, де вже визначена концентрація, стає поточним. Тривалість кроку в часі має корегуватися: зменшуватись одразу ж після різких змін у часі параметрів міграції та граничних умов та збільшуватись у періоди, коли значення цих параметрів відносно стабільні.

Умови застосування різницевої схем. Явна схема як алгоритм значно простіша, але має суттєві обмеження на розмір кроків сітки. Так, у разі рівномірної сітки $\Delta x = \Delta y = l$ умова стійкості розрахунку за явною схемою визначається співвідношенням

$$\Delta t \leq l^2 / 4D_{max} , \quad (2.42)$$

де D_{max} – максимальний коефіцієнт конвективної дифузії серед п'яти вузлів. Отже, крок за часом не можна задавати довільно.

Не менш важливі при розрахунку міграції обмеження на крок сітки, зумовлені співвідношеннями між конвективним (швидкістю фільтрації) та дифузійним потоком маси (коефіцієнтом дифузії). Так,

для кроків сітки та компонент швидкості фільтрації уздовж осей Ox та Oy мають виконуватися нерівності:

$$\Delta x \leq 2D_x/v_x, \Delta y \leq 2D_y/v_y. \quad (2.43)$$

Наприклад, якщо $D_x = 0,05$ м²/добу, $v_x = 0,1$ м/добу, то для кроку сітки Δx не може перевищувати 1 м. Звичайно, при розрахунках використовується більший крок сітки (кілька десятків – сотень метрів), для цього застосовуються спеціальні прийоми, які ускладнюють обчислення.

Відомі також інші обчислювальні схеми міграції [9, 12, 14], розрахунок за якими не залежить від співвідношень (2.42) – (2.43), але вони більш складні для програмування.

Цей чинник дуже важливий при виконанні довгострокових прогнозів та моделювання складних об'єктів протягом тривалого часу. Слід зважати, що похибка розрахунку метода скінченних різниць пропорційна l^2 , тому збільшення кроку сітки заради збільшення кроку в часі часто неприпустимо з міркувань точності моделювання.

На відміну від явної схеми, у неявній на попередньому кроці за часом відома лише концентрація у центральному блоці, а всі інші значення розраховуються. У цій схемі відсутнє обмеження (2.42), неявна схема – стійка і використовується набагато частіше, ніж явна. Поширеною на практиці є локально-одновимірна схема з чергуванням розрахунків уздовж осей Ox та Oy на кожному кроці у часі.

Що стосується моделювання фільтрації у двох водоносних горизонтах, розділених водотривким шаром, то існує два підходи. Згідно з першим – слабопроникні прошарки не моделюються, а концентрація в них не розраховується. Тоді вирішується система рівнянь вигляду (2.40) для кожного водоносного горизонту. Згідно з другим підходом, який реалізований у програмі ModFlow (лабораторні роботи з підрозділів 5.2 та 5.3), розрахунки концентрації проводяться також і у водотривких шарах. Це більш адекватно реальності, але потребує ретельного визначення вертикальної проникності всіх трьох шарів.

Межові умови. На зовнішніх межах області міграції найчастіше задаються змінні за часом і у просторі (уздовж певного контуру або на поверхні):

1) концентрація у поверхневих водах (річці, ставку) – умова (1.17),

2) співвідношення між концентрацією та масовим потоком – умова (1.18).

Умова першого роду (1.17) ставиться у разі високої швидкості фільтрації на вхідній межі, коли можна нехтувати дифузійним потоком. Значення концентрації задаються у граничних блоках і не залежать від результатів розрахунку. Більш загальна умова (1.18) враховує як конвективний, так і дифузійний потоки через межу. У цьому випадку записується різницеве співвідношення між концентрацією у граничному і внутрішньому блоках; значення концентрації в обох блоках визначаються на основі розрахунку. Ці умови можуть ставитись у блоках як на зовнішніх, так і внутрішніх межах області міграції.

У внутрішніх блоках із джерелами речовини (хвостосховища, відстійники) задається масопотік, що обчислюється за формулою (2.36). Геометрична схематизація меж проводиться, виходячи з умови максимальної близькості граничних блоків до реальної межі області, де задана концентрація чи витрата.

Схематизація неоднорідної структури області, апроксимація межових та початкових умов, розв'язок системи рівнянь та оформлення результатів у графічному вигляді виконуються за окремими алгоритмами і можуть бути ефективно здійснені за допомогою спеціального програмного забезпечення. Одним з таких пакетів є **Visual ModFlow**, у якому виконуються лабораторні роботи з підрозділів 5.2 та 5.3.

Питання для самоконтролю

1. Охарактеризуйте вхідні дані, необхідні для скінченнорізницевого моделювання міграції.

2. Як будується сітка при скінченнорізницевому моделюванні? Охарактеризуйте її елементи.

3. Визначте складові балансу маси в блоці скінченнорізницевої сітки.

4. Як проводиться часова дискретизація при скінченнорізницевому моделюванні?

5. Визначте різницю між явною та неявною схемами. Яка з них є більш стійкою з точки зору обчислень?

6. Які обмеження на розмір кроків сітки існують для явної та неявної схем?

7. Які умови найчастіше ставляться на межах області міграції, чим вони відрізняються?

Задача

Визначити зміну концентрації речовини в підземних водах у блоці скінченнорізницевої сітки розміром 25×25 м за 1 добу. Початкові значення концентрації у сусідніх блоках C_1, \dots, C_4 дорівнюють 1,0, 1,0, 0,1 та 0,1 г/л, у центральному блоці – 0,5 г/л; потужність водоносного горизонту 10 м, швидкість фільтрації спрямована вздовж осі Ox і у всіх блоках дорівнює 0,1 м/добу, параметр дисперсії $\delta = 2$ м, параметр розпаду $\lambda = 10^{-4}$ добу $^{-1}$, ефективна пористість $n_e = 0,8$, швидкість фільтрації через водотривкий шар 10^{-3} м/добу.

Розв'язування. Коефіцієнт гідродинамічної дисперсії обчислюється за формулою $D = \delta v_x$ і дорівнює 0,2 м 2 /добу.

Визначимо потоки маси, що надходять і виходять з центрального блоку в горизонтальному напрямку

$$q_{1,0} = F_{1,0} \left(v_{1,0} C_1 - D_{1,0} \frac{C_0 - C_1}{\Delta x} \right) = 25 \cdot 10 \cdot \left(0,1 \cdot 1,0 - 0,2 \cdot \frac{0,5 - 1,0}{25} \right) = 26 \text{ кг/добу,}$$

$$q_{2,0} = F_{2,0} \left(v_{2,0} C_2 - D_{2,0} \frac{C_0 - C_2}{\Delta y} \right) = 25 \cdot 10 \cdot \left(0,0 \cdot 1,0 - 0,2 \cdot \frac{0,5 - 1,0}{25} \right) = 1 \text{ кг/добу,}$$

$$q_{0,3} = F_{3,0} \left(v_{3,0} C_0 - D_{3,0} \frac{C_3 - C_0}{\Delta x} \right) = 25 \cdot 10 \cdot \left(0,1 \cdot 0,5 - 0,2 \cdot \frac{0,1 - 0,5}{25} \right) = 13,3 \text{ кг/добу,}$$

$$q_{0,4} = F_{4,0} \left(v_{4,0} C_0 - D_{4,0} \frac{C_4 - C_0}{\Delta y} \right) = 25 \cdot 10 \cdot \left(0,0 \cdot 1,0 - 0,2 \cdot \frac{0,1 - 0,5}{25} \right) = 0,8 \text{ кг/добу.}$$

Зменшення маси у центральному блоці за рахунок перетікання через нижній водотривкий шар згідно з формулою (2.37) дає

$$q_{v,2} = C_0 w_2 \Delta x \Delta y = 0,1 \cdot 0,5 \cdot 10^{-3} \cdot 25 \cdot 25 = 0,3125 \text{ кг/добу.}$$

Зменшення маси у центральному блоці за рахунок розпаду речовини з урахуванням рівноважної сорбції згідно з формулою (2.38) дає

$$q_R = \lambda C_0 \Delta x \Delta y n_0 = 10 - 4 \cdot 0,5 \cdot 25 \cdot 25 \cdot 10 \cdot 0,8 = 0,25 \text{ кг/добу.}$$

Сумарне збільшення маси в центральному блоці $\approx 12,34$ кг/добу. За явною схемою (2.40) визначаємо зміну концентрації речовини у підземних водах

$$\Delta C_0 = \frac{\Delta t}{n_0 \Delta x \Delta y t_0} (\sum q_{i,0} - q_{v,2} - q_R) = \frac{12,34}{0,8 \cdot 25 \cdot 25 \cdot 10} \approx 2,5 \text{ г/м}^3.$$

Таким чином, збільшення концентрації речовини у підземних водах у межах центрального блоку за одну добу становитиме $2,5 \text{ г/м}^3$.

Розділ 3

СТАТИСТИЧНІ МЕТОДИ В ГІДРОГЕОЕКОЛОГІЇ

3.1. Основні поняття статистики

Функція та щільність розподілу. Основні характеристики випадкової величини: математичне сподівання, мода, медіана, дисперсія, коефіцієнт варіації, асиметрія та ексцес. Закони розподілу: нормальний, логнормальний та біноміальний. Статистичні оцінки. Гістограми та емпіричні функції розподілу.

Функція та щільність розподілу. Основою статистичного моделювання є поняття ймовірності випадкової події, що являє собою кількісну міру можливості того, що ця подія відбудеться. Ймовірність вірогідної події дорівнює одиниці, а ймовірність неможливої події – нулю. Таким чином, ймовірність випадкової події виражається числом у діапазоні від 0 до 1.

Випадкові величини бувають дискретними та неперервними. Дискретна випадкова величина приймає значення з обмеженої множини результатів. Наприклад, це може бути кількість зерен певного мінералу в зразках гірської породи, кількість свердловин, де перевищені санітарні норми на вміст токсичних речовин у воді, тощо. Неперервна випадкова величина, наприклад, концентрація речовин у природних водах, вміст важких металів у зразках ґрунтів та ін., може приймати у заданому діапазоні будь-які значення.

Кількість появ події у серії випробувань називається її частотою, а відношення кількості появ події до загальної кількості дослідів – її частістю. У разі збільшення числа дослідів (обсягу вибірки) частість події сходиться до її ймовірності.

Функція розподілу випадкової величини встановлює зв'язок між її значеннями та ймовірностями, з якими вони приймаються. Отже, функція розподілу $P(x)$ дорівнює ймовірності того, що вибіркове значення випадкової величини ξ не перевищить певної границі x , тобто $\xi \leq x$. Функція розподілу є такою, що не зменшується, а її значення знаходяться у діапазоні $[0, 1]$.

Щільність розподілу випадкової величини $p(x)$ характеризує ймовірність потрапляння її значення у певний діапазон

$x < \xi \leq (x + \Delta x)$. Функція та щільність розподілу пов'язані співвідношенням

$$P(x) = \int_{-\infty}^x p(x) dx, \quad (3.1)$$

причому
$$\int_{-\infty}^{+\infty} p(x) dx = 1.$$

Основними характеристиками випадкової величини є математичне сподівання, мода, медіана, а також дисперсія, коефіцієнт варіації, асиметрія та ексцес.

Математичне сподівання дискретної випадкової величини, яка може приймати n значень x_i з ймовірностями p_i , $i=1, \dots, n$, визначається за формулою

$$Mx = \sum_{i=1}^n x_i p_i. \quad (3.2)$$

Математичне сподівання неперервної випадкової величини визначається інтегралом:

$$Mx = \int_{-\infty}^{+\infty} xp(x) dx. \quad (3.3)$$

Мода випадкової величини M_o вказує на її найбільш імовірне значення (для дискретної величини) або на значення з максимальною щільністю розподілу (для неперервної величини).

Медіана випадкової величини M_e вказує на її значення для ймовірності 0,5, тобто на таке значення, для якого ймовірності появи більших та менших значень однакові

$$P(\xi \leq M_e) = P(\xi > M_e). \quad (3.4)$$

Головною характеристикою розкиду випадкової величини є її дисперсія, що визначається для неперервної та дискретної величин відповідно за формулами

$$\sigma_n^2 = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - Mx)^2 p(x) dx, \quad (3.5)$$

$$\sigma_d^2 = \sum_{i=1}^N (x_i - Mx)^2 p_i. \quad (3.6)$$

На основі дисперсій обчислюються стандартне квадратичне відхилення $\sigma = \sqrt{\sigma^2}$ та коефіцієнт варіації

$$v = \frac{\sigma}{Mx} \cdot 100\%. \quad (3.7)$$

Коефіцієнтом асиметрії називають величину

$$A = \frac{\mu_3}{\sigma^3}, \quad (3.8)$$

де момент третього порядку μ_3 обчислюється для неперервної та дискретної величин відповідно за формулами

$$\mu_{3,n} = \int_{-\infty}^{+\infty} (x - Mx)^3 p(x) dx, \quad (3.9)$$

$$\mu_{3,d} = \sum_{i=1}^N (x_i - Mx)^3 p_i. \quad (3.10)$$

Якщо $A > 0$, то розподіл є позитивно асиметричним, якщо $A < 0$, то – негативно асиметричним (рис. 3.1).

Ступінь гостроти вершини кривої щільності розподілу $p(x)$ або концентрування значень випадкової величини навколо середнього значення характеризується параметром ексцесу

$$E = \frac{\mu_4}{\sigma^4} - 3, \quad (3.11)$$

де μ_4 – момент четвертого порядку, що обчислюється аналогічно формулам (3.9) і (3.10) із заміною індексу та ступеня «3» на «4». Криві щільності розподілу, у яких більш гостра вершина порівняно з

нормальним розподілом, для якого $E = 0$, мають додатний ексцес $E > 0$, більш пологі криві – від’ємний ексцес $E < 0$ (рис. 3.2).

Слід зазначити, що площа фігури, яка обмежена зверху кривою щільності та знизу – віссю абсцис, дорівнює одиниці.

Закони розподілу. Для апроксимації (наближеної заміни) емпіричних розподілів, застосовних до опису геоекологічних процесів, дуже часто використовуються нормальний та логнормальний закони розподілу (неперервні випадкові величини) та біноміальний (дискретні випадкові величини).

Нормальним називається закон розподілу випадкової величини, щільність якого визначається за формулою

$$p(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(x - Mx)^2}{2\sigma^2}\right). \quad (3.12)$$

Крива щільності нормального розподілу є симетричною відносно математичного сподівання (рис. 3.2), а мода, медіана та середнє значення – збігаються.

Нормальний розподіл виникає тоді, коли випадкова величина розглядається як сума великої кількості незалежних випадкових величин, вплив кожної з них на цю суму є рівномірним і малим. Нормальним законом, зокрема, описуються розподіли випадкових похибок вимірювань об’ємної ваги, щільності ґрунту, пористості, вмісту вологи, потужності геологічних структур.

Розподіл випадкової величини $\xi = (x - Mx)/\sigma$ з математичним сподіванням $M\xi = 0$ та дисперсією $\sigma_\xi^2 = 1$ називається нормованим; його значення табульовані у [13].

Логарифмічно нормальним (логнормальним) називається закон розподілу випадкової величини, щільність якого визначається за формулою

$$p(x) = \frac{1}{\sigma_{\ln x} \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(\ln x - M(\ln x))^2}{2\sigma_{\ln x}^2}\right). \quad (3.13)$$

Для логнормального розподілу середнє значення, мода та медіана не збігаються.

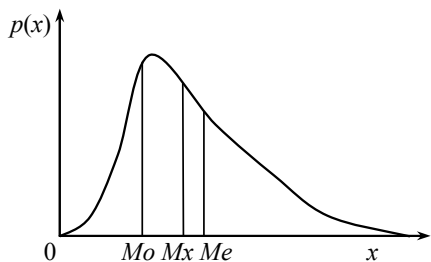


Рис. 3.1. Крива щільності несиметричного розподілу ($A > 0$) та його мода Mo , медіана Me і середнє значення Mx

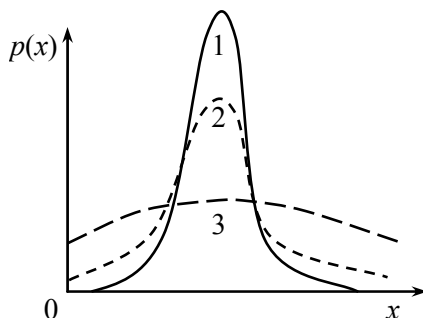


Рис. 3.2. Криві щільності симетричного розподілу з різними значеннями ексцесу: $1 - E > 0$; $2 - E = 0$; $3 - E < 0$

Згідно з логнормальним законом, чим менше значення, тим менше його вплив, великі значення зустрічаються нечасто, але можуть зробити значний вплив на загальний результат. Логнормальним є, зокрема, розподіл діаметра частинок при механічному дробленні під дією певної сили, вмісту кольорових та рідкоземельних металів у гірських породах та рудах, параметрів тріщинуватості гірських порід, розмірів пор у пісковиках тощо.

Біноміальний закон описує розподіл подій з двома можливими результатами, одна з них (А) – з імовірністю p , інша (В) – з імовірністю $q = 1 - p$. У разі великої кількості випробувань частість події А наближено дорівнює її ймовірності, тобто $p \approx k/n$, де k – кількість випадків, коли відбулася подія А у серії випробувань загальною кількістю n .

Ймовірність ситуації, коли з n разів подія А відбулася k разів, обчислюється за формулою

$$p_n(k) = C_n^k p^k (1-p)^{n-k}, \quad (3.14)$$

де $C_n^k = \frac{n!}{k!(n-k)!}$, $n! = 1 \cdot 2 \cdot 3 \cdot \dots \cdot n$.

Математичне сподівання біноміального розподілу $Mx = np$, а дисперсія – $\sigma^2 = np(1-p)$. Даний розподіл може використовуватися

для опису процентного вмісту зерен певної форми та розміру в зразках гірських порід, перевищення допустимих концентрацій у пробах води чи ґрунту та ін.

Статистичні оцінки. Поміж оцінок середніх значень параметрів (табл. 3.1) найчастіше використовується середнє арифметичне, оскільки для симетричних розподілів ця оцінка збігається зі збільшенням обсягу вибірки до середнього значення параметра у розподілі. Але для несиметричних розподілів така оцінка виявляється зміщеною від оцінюваного параметра, тому вид ефективної оцінки залежить від розподілу. Для дисперсії оцінка, обчислена за формулою $S^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (x_i - Mx)^2$, є ефективною для нормального розподілу, але для логнормального (несиметричного) – неефективна навіть у разі великого об'єму вибірки.

Таблиця 3.1
Оцінки середнього значення параметра у вибірці

Середнє арифметичне	Середнє гармонічне	Середнє геометричне	Середнє логарифмічне	Середнє квадратичне
$\bar{x}_a = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i$	$\bar{x}_h = \frac{n}{\sum_{i=1}^n 1/x_i}$	$\bar{x}_g = \sqrt[n]{x_1 x_2 \dots x_n}$	$\overline{\ln x} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \ln x_i$	$\bar{x}_q = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n x_i^2}$

Гістограми та емпіричні функції розподілу будуються на основі обробки експериментальних результатів. Нехай значення вимірюваної величини x_1, \dots, x_k спостерігались відповідно m_1, \dots, m_k

разів, причому $n = \sum_{i=1}^k m_i$. Значення називають варіантами, числа m_i – частотами, $w_i = m_i/n$ – відносними частотами. Очевидно, що сума всіх відносних частот дорівнює одиниці.

Сукупність варіант, записаних у зростаючому порядку, називається статистичним рядом розподілу. Часто буває доцільним розбити всю сукупність вимірюваних значень на інтервали. Рациональна кількість інтервалів, яка дозволяє характеризувати особливості

емпіричного розподілу, може бути визначена за формулою Штюргерса [13]

$$k_s = 1 + 3,32 \ln n. \quad (3.15)$$

Число k_s має округлятися до найближчого цілого. Зі зростанням обсягу вибірки число k_s зростає повільно: $k_s = 11$ при $n = 20$, $k_s = 16$ при $n = 100$.

Для побудови гістограм на осі абсцис відкладають інтервали. На кожному з них, як на основі, будуються прямокутники висотою $h_i = w_i/l_i$ де l_i – довжина i -го інтервалу. Площа кожного прямокутника дорівнює відносній частоті, а сумарна площа прямокутників – одиниці. Це відповідає тому, що площа фігури під кривою щільності будь-якого розподілу також дорівнює одиниці. За гістограмою, що є аналогом щільності розподілу, можна побудувати емпіричну функцію розподілу, яка є вибірковою аналогом теоретичної функції розподілу,

$$P^*(x) = \sum_{x_i < x} w_i, \quad (3.16)$$

де сума береться за всіма тими індексами, для яких $x_i < x$.

Приклад. За результатами гідрогеохімічних досліджень у спостережних свердловинах двох суміжних водоносних горизонтів визначено вміст сульфатів та сухого залишку (табл. 3.2). За наведеними даними побудуємо емпіричні функції розподілу та гістограми.

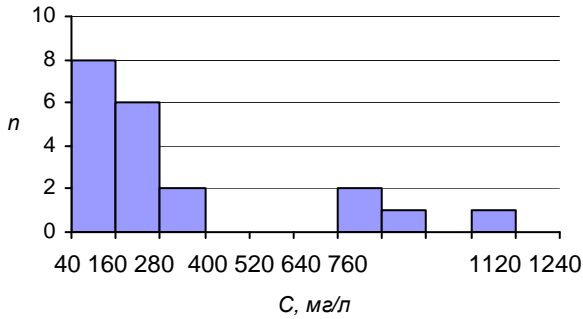
Для вибірки обсягом $n = 20$ згідно з формулою (3.15) оптимальне число діапазонів дорівнює 11. Для сульфатів діапазон значень для даної вибірки від 48 до 1344 мг/л розбиваємо на інтервали довжиною 120 мг/л, для сухого залишку діапазон значень від 270 до 2750 мг/л – інтервалами довжиною 226 мг/л. На осі ординат на гістограмах відкладаємо кількість значень концентрації у певному діапазоні. Побудовані гістограми та функції розподілу показані на рис. 3.3 та 3.4. Очевидно, що розподіл має виражену ліву асиметрію: більшість значень розташована зліва від середнього значення (14 з 20 для вмісту сульфатів і 15 з 20 для сухого залишку). Таким чином, переважають невеликі значення вмісту сульфатів та сухого залишку, разом з тим у вибірці наявні 4–5 значень, що суттєво більші за середні.

Таблиця 3.2

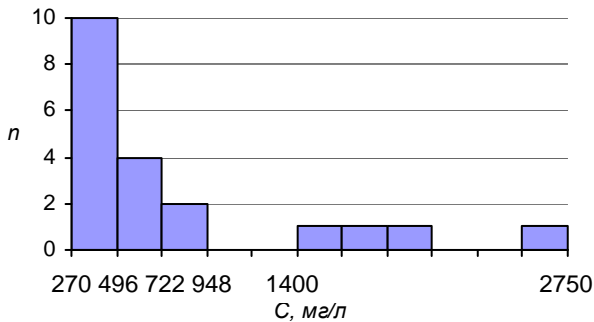
Вміст сульфатів (C_{SO_4} , мг/л) та сухого залишку ($C_{схз}$, мг/л) у пробах підземних вод зі свердловин

№ св.	2	22	6675	5761	6708	6711	6717	2а	3а	3р
C_{SO_4}	240	768	120	1344	336	101	960	144	240	240
$C_{схз}$	811	1626	326	1856	629	578	2745	470	482	638

№ св.	4р	5р	7р	8р	9р	10р	13р	16	17р	18р
C_{SO_4}	186	120	50	664	359	168	168	48	144	154
$C_{схз}$	450	479	271	1287	724	515	436	323	420	464

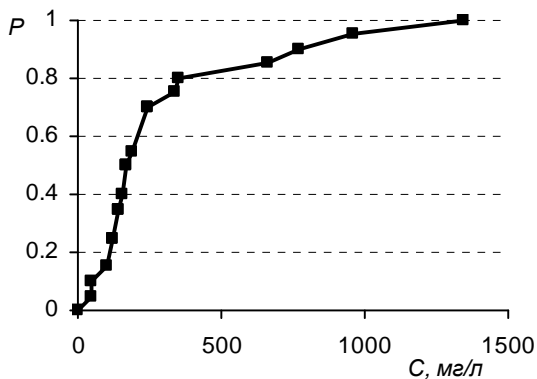


а)

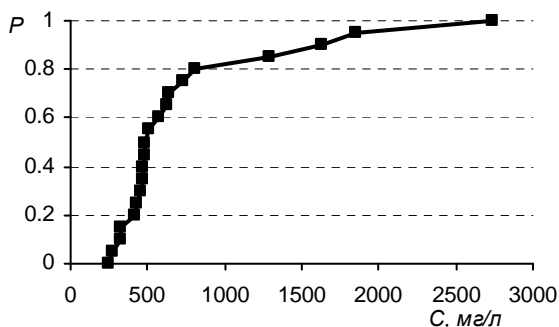


б)

Рис. 3.3. Гістограми вмісту сульфатів (а) та сухого залишку (б) у зразках підземних вод зі спостережних свердловин



а)



б)

Рис. 3.4. Емпіричні функції розподілу вмісту сульфатів (а) та сухого залишку (б) у зразках підземних вод зі спостережних свердловин

Питання для самоконтролю

1. Дайте визначення функції розподілу та щільності розподілу випадкової величини. Наведіть приклади їхніх емпіричних аналогів у геоєкології.

2. Чим відрізняються дискретні та неперервні випадкові величини?

3. Як визначається математичне сподівання та дисперсія випадкових величин?

4. Для чого використовуються коефіцієнт асиметрії та ексцес?

5. Чим відрізняються нормальний та логнормальний закони розподілу? Наведіть приклади їхнього використання в геоекологічних дослідженнях.

6. Охарактеризуйте біноміальний закон розподілу.

7. Порівняйте найпоширеніші статистичні оцінки середнього значення.

Задача

Використовуючи формули (3.15) і (3.16), для заданих викладачем вибіркового даних побудувати гістограму і функцію емпіричного розподілу аналогічно прикладу в тексті підрозділу 3.1.

3.2. Перевірка статистичних гіпотез

Статистичні гіпотези. Визначення виду вибіркового розподілу. Перевірка однорідності вибірок. Перевірка гіпотези про рівність середніх. Критерій Фішера перевірки рівності дисперсій. Дисперсійний аналіз.

Статистичні гіпотези формулюються для перевірки схожості або відмінності певних процесів (об'єктів). Спочатку визначається вид (закон) розподілу, відповідний даним вибірці, після чого перевіряються гіпотези про рівність числових характеристик певного параметра, зокрема:

- 1) про однорідність досліджуваного об'єкта;
- 2) про рівність середніх значень параметра, отриманого різними методами для того ж об'єкта;
- 3) про рівність дисперсій двох випадкових величин за вибілковими даними.

Наприклад, статистичною гіпотезою може бути твердження щодо однаковості рівня забруднення води у двох різних річках на основі даних про вміст токсичних компонентів.

Статистична перевірка гіпотез виконується за критеріями згоди. Критерієм згоди називається значення деякої функції $f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n)$ від випадкових величин $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_n$, що характеризують гіпотезу, яка перевіряється. Функція f має бути випадковою величиною з відомим

розподілом, за яким зручно перевірити гіпотезу. Статистична гіпотеза приймається чи відхиляється, якщо значення функції f більше чи менше (залежно від формулювання) за теоретичне значення f для аналогічних умов і заданої ймовірності p . Ця ймовірність відповідає практично неможливій події і називається *рівнем значущості*. Ймовірність $(1-p)$, що визначає міру правильності рішення відносно гіпотези і відповідає практично достовірній події, називається *надійною ймовірністю*. В геоекологічних дослідженнях зазвичай використовуються надійні ймовірності 90 – 95% та рівень значущості 5 – 10%.

Якщо справедлива гіпотеза відхиляється, то робиться помилка першого роду, якщо приймається неправильна гіпотеза, то робиться помилка другого роду. Якщо ймовірність помилки другого роду позначити через β , то ймовірність відсутності такої помилки $(1-\beta)$ називається *потужністю* даного критерію відносно альтернативної гіпотези.

Наприклад, перевіряється гіпотеза про те, що якість води відповідає санітарним нормам. У разі неправильного висновку щодо перевищення допустимого рівня забруднення у фактично чистій воді робиться помилка першого роду, у разі неправильного висновку щодо прийнятної якості фактично забрудненої води робиться помилка другого роду. Помилка першого роду призводить до невиправданих економічних втрат, помилка другого роду загрожує здоров'ю людей.

Визначення виду вибіркового розподілу. Закон розподілу випадкової величини встановлюється з більшою надійністю при великому обсязі вибірки за умови її однорідності. Щоб розрізнити нормальний та логнормальний закони, потрібно не менше ніж 60 – 100 результатів [17].

Вид розподілу суттєво впливає на надійність та стійкість оцінок середнього і дисперсії. Так, параметри Mx і σ , обчислені за формулами (3.2) і (3.5), є ефективними лише для нормального розподілу, оскільки значення, більші та менші за середнє, зустрічаються з рівною ймовірністю. Для логнормального розподілу бувають як малі, так і великі значення, а оцінка середнього не буде стабільною. У цьому разі використовується середнє логарифмічне, більш стійке до великого розкиду експериментальних значень. Отже, відповідність параметрів теоретичного розподілу емпіричному є

головною умовою об'єктивності висновків на основі експериментальних даних.

Ознакою нормального розподілу є рівність нулю коефіцієнта асиметрії та ексцесу

$$A = 0, \quad E = 0. \quad (3.17)$$

Але вибіркові значення A та E завжди відрізняються від нуля і складають деяку сукупність, розподілену майже нормально при великих n зі стандартними відхиленнями σ_A та σ_E , тобто

$$\sigma_A = \sqrt{\frac{6}{n}}, \quad \sigma_E = \sqrt{\frac{24}{n}}. \quad (3.18)$$

Зі збільшенням n параметри σ_A , σ_E наближаються до нуля. З імовірністю 99,73 % можна вважати, що вибірковий розподіл описується нормальним законом, якщо виконуються умови

$$A < 3\sigma_A, \quad E < 3\sigma_E. \quad (3.19)$$

У разі невиконання умов (3.19) використання оцінок (3.2) і (3.5) для гідрохімічних висновків є необґрунтованим.

Приклад. Перевіримо застосовність нормального закону до вибірок з табл. 3.2. Для цього виконаємо обчислення, враховуючи, що при $n = 20$ $\sigma_A \approx 0,548$, $\sigma_E \approx 1,095$:

– для вмісту сульфатів $A \approx 1,654$, $E \approx 3,32$

$$\left| \frac{A}{\sigma_A} \right| \approx 3,02 > 3, \quad \left| \frac{E}{\sigma_E} \right| \approx 3,03 > 3;$$

– для сухого залишку $A \approx 1,95$, $E \approx 4,31$

$$\left| \frac{A}{\sigma_A} \right| \approx 3,56 > 3, \quad \left| \frac{E}{\sigma_E} \right| \approx 3,94 > 3.$$

Тому гіпотеза про нормальний розподіл цих компонентів у підземних водах відкидається, що підтверджується зовнішнім виглядом щільностей та функцій розподілу (рис. 3.3, 3.4), які мають виражену ліву асиметрію. Це означає, що переважають проби з відносно

невеликим вмістом досліджуваних компонентів, разом з тим у невеликій кількості проб зафіксовані високі значення.

Якщо розподіл має виражену асиметрію, що помітна навіть візуально (рис. 3.1), слід перевірити застосовність логнормального закону. Для цього обчислюються величини

$$A_{\ln} = \frac{\sum_{i=1}^n (\ln C_i - \ln \bar{C})^3}{n \sigma_{\ln}^3}, \quad E_{\ln} = \frac{\sum_{i=1}^n (\ln C_i - \ln \bar{C})^4}{n \sigma_{\ln}^4}, \quad (3.20)$$

де σ_{\ln} – середньоквадратичне відхилення логарифмів вимірюваних величин. Таким чином, параметри A_{\ln} та E_{\ln} є коефіцієнтом асиметрії та ексцесу для розподілу логарифмів випадкових величин. У разі виконання умов для цих параметрів, аналогічних (3.19), застосовують логнормальний закон до даної вибірки.

При малому обсязі вибірки ($n < 120$) можна використовувати описаний далі критерій перевірки гіпотези про нормальний закон її розподілу [13]. Спочатку обчислюють середнє абсолютне відхилення

$$\delta = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n |x - x_i|, \text{ після чого перевіряють умову:}$$

$$\frac{\delta}{\sigma} - 0,7979 < \frac{0,4}{\sqrt{n}}, \quad (3.21)$$

де σ – середньоквадратичне відхилення. Якщо співвідношення (3.21) виконується, то гіпотеза про застосовність нормального закону до даної вибірки є правомірною.

Для більш точної перевірки відповідності вибірки нормальному закону розподілу рекомендується використовувати критерії Пірсона χ^2 і Колмогорова–Смирнова [8, 10].

Перевірка однорідності вибірок. Досвід обробки гідрохімічних даних свідчить, що варіаційні ряди мають кілька значень (до 5%), які дуже далекі від середнього значення. Враховуючи можливість помилок при одержанні результатів, слід визначитися щодо приналежності цих екстремальних значень до вибірки.

У разі великого об'єму вибірки ці значення несуттєво впливають на середнє чи дисперсію, але можуть значно змінити моменти вищого порядку: асиметрію та ексцес. Через кілька екстремальних

значень емпіричний розподіл, що описується нормальним законом, може бути помилково апроксимований як логнормальний чи навпаки. При малих обсягах вибірки навіть одне екстремальне значення може суттєво викривити оцінки всіх статистичних параметрів.

Часто вважається, що геологічний об'єкт є однорідним відносно досліджуваної ознаки. Це можна визначити, наприклад, на основі аналізу геологічної будови. Але на початкових стадіях досліджень дане питання важко вирішити однозначно, оскільки необхідна статистична перевірка даних відносно мінливості ознаки. Перевірка статистичної однорідності об'єкта передбачає виділення аномальних значень та подальше розділення неоднорідних вибірових сукупностей.

Задача виявлення аномальних значень не має універсального вирішення статистичними методами. Аномальне значення часто визначається дослідним шляхом і аналізом природного об'єкта. Для відокремлення аномальних значень сукупність результатів спостережень розглядається як вибірка з різних генеральних сукупностей – «фоновій» та «аномальній»; при цьому аномальні значення присутні у вибірці в невеликій кількості або відсутні взагалі.

У разі нормального розподілу фоновій генеральній сукупності відокремити аномальні значення можна за допомогою параметричних критеріїв Смирнова та Фергюсона. Згідно з критерієм Смирнова обчислюється величина

$$t = \frac{x_{max} - \bar{x}}{S_{cm}^2}, \quad S_{cm}^2 = S^2 \left(\frac{n-1}{n} \right), \quad (3.22)$$

де x_{max} – максимальне значення у вибірці; S^2 – оцінка дисперсії.

Якщо значення t перевищує допустиме табличне значення з розподілу Смирнова для заданої надійної ймовірності та степеня вільності [10], то максимальне значення слід вважати аномальним.

Стосовно критерію Фергюсона вважається, що оцінка коефіцієнта асиметрії A розподілена асимптотично (тобто при великих значеннях n) нормально з математичним сподіванням 0 та дисперсією σ_A^2 . Якщо розраховане значення A перевищує допустиме

табличне для заданої надійної ймовірності та степеня вільності [10], то максимальне значення слід вважати аномальним.

Якщо емпіричний розподіл видається симетричним, а крайні значення є явно екстремальними, то перевірка однорідності виконується за «правилом трьох сігм» (3σ). З імовірністю 99,73 % можна стверджувати, що сумнівні значення (x_{min} чи x_{max}) не належать генеральній сукупності, якщо виконуються нерівності

$$x_{min} < \bar{x} - 3\sigma, \quad \bar{x} + 3\sigma < x_{max}. \quad (3.23)$$

Екстремальні величини вмісту компонентів є найбільш цікавими при виділенні гідрохімічних аномалій і розвідці родовищ корисних копалин, хоча такі числа не роблять великого впливу на визначення гідрохімічного фону.

Якщо сумнівне значення виходить за межі інтервалу $[\bar{x} - 3\sigma, \bar{x} + 3\sigma]$, то його слід виключити з вибірки і виконати повторний розрахунок статистичних параметрів. Але такий спосіб не є строгим, оскільки він не виключає помилки першого та другого роду.

Приклад. Визначимо, чи є екстремальні значення у вибірках, поданих у табл. 3.2. Середні значення вмісту сульфатів та сухого залишку для всіх свердловин становлять відповідно 327,3 та 776,5 мг/л, а середньоквадратичні відхилення – 342,2 та 630,6 мг/л. Перевіримо нерівності (3.23):

для сульфатів $x_{max} = 1344$, $x_{max} < 327,3 + 3 \cdot 342,2 = 1353,9$ (межа не перевищена),

для сухого залишку $x_{max} = 2745$, $x_{max} > 776,5 + 3 \cdot 630,6 = 2668,3$ (межа перевищена).

Зауважимо, що межа $\bar{x} + 3\sigma$ майже досягнута і для сульфатів. Отже, можна стверджувати, що ці максимальні значення є аномально високими для даної сукупності. Але такий висновок справедливий у разі нормального розподілу, якщо ж встановлено правомірність логнормального закону, то відкидання крайніх значень є некоректним.

Перевірка гіпотези про рівність середніх значень виконується за критеріями Стьюдента, Ван дер Вардена, Вілкоксона та іншими [10]. Розглянемо детальніше критерій Стьюдента. Позначимо через x_1, x_2, \dots, x_n та y_1, y_2, \dots, y_m значення вибірових даних на різних об'єктах

або такі, що отримані різними методами. Вважається, що розподіли цих величин є нормальними, n та m – обсяги вибірок. Тоді величина

$$t = \frac{|\bar{x} - \bar{y}|}{\sqrt{\frac{S_x^2}{n} + \frac{S_y^2}{m}}}, \quad (3.24)$$

описується розподілом Стюдента з $n + m - 2$ степенями вільності. Тут \bar{x} і \bar{y} – вибіркові оцінки середнього значення, S_x^2 і S_y^2 – вибіркові оцінки дисперсії. Перевірка гіпотези про рівність середніх двох вибірок полягає в обчисленні величини t та її порівнянні з табличним значенням для даної кількості степенів вільності і надійної ймовірності. Якщо значення t перевищує табличне, то гіпотеза про рівність вибірових середніх відхиляється, тобто різниця між середніми значеннями статистично значуща.

Приклад. У табл. 3.2 наведені значення вимірів у двох водоносних горизонтах: у першому від поверхні – ґрунтовому (свердловини № 2, 22, 6675, 5761, 6708, 6711, 6717) та неогеновому – другому від поверхні (всі інші свердловини). За цими даними визначені середні значення та дисперсії вмісту сульфатів та сухого залишку, що наведені в табл. 3.3. Як бачимо, середні значення цих показників помітно вище у ґрунтовому горизонті.

Згідно з формулою (3.24) значення величини t для сульфатів становить 1,86, для сухого залишку – 2,03. Для надійної ймовірності 90 % критичне значення критерію Стюдента при $7 + 13 - 2 = 18$ степенях вільності дорівнює 1,73, а для надійної ймовірності 95 % і 18 степенях вільності – 2,10.

Таблиця 3.3

Параметри вмісту сульфатів та сухого залишку

Горизонт	Сульфати		Сухий залишок	
	Середнє, мг/л	Дисперсія	Середнє, мг/л	Дисперсія
Ґрунтовий	552,7	229068	1224,4	770464
Неогеновий	205,8	25266	535,3	64361

Отже, при «м'якому» критерії з ймовірністю помилки 10 % можна стверджувати, що вміст сульфатів та сухого залишку у водах ґрунтового горизонту суттєво вищий, ніж у неогеновому, у разі більш «строгого» критерію з ймовірністю помилки 5 % ця гіпотеза відкидається, тобто слід вважати, що досліджувані показники приблизно однакові в обох водоносних горизонтах.

Критерій Фішера перевірки рівності дисперсій. Мінливість об'єктів та процесів визначається величиною дисперсії та коефіцієнтом варіації. У разі однакових параметрів дисперсії можна застосовувати принцип аналогії до різних об'єктів. Відмінність дисперсії вказує на різні умови формування об'єктів та процесів, зокрема, більша дисперсія характерна для процесів більшої тривалості. Якщо кількісні дані відносно природного об'єкта отримані різними способами, то більш надійним визнається спосіб, який дає найменший розкид значень досліджуваної ознаки.

Згідно з цим критерієм на основі значень з двох вибірок (x_1, x_2, \dots, x_n) та (y_1, y_2, \dots, y_m) обчислюється відношення дисперсій

$$F = \frac{S_x^2}{S_y^2}, S_x^2 > S_y^2, \quad (3.25)$$

яке розподілено за законом Фішера з $n-1$ та $m-1$ степенями вільності. Величина F порівнюється з табличним значенням $F_{n-1, m-1, \alpha}$, де α – надійна ймовірність. Якщо обчислене значення критерію Фішера перевищує табличне, то гіпотеза про рівність дисперсій відхиляється.

Цей критерій має невисоку ефективність для несиметричних розподілів, наприклад для логнормального. У цьому разі необхідно користуватися максимально правдоподібними оцінками дисперсії [10] або перевіряти гіпотезу про рівність дисперсій логарифмів значень досліджуваної ознаки.

Дисперсійний аналіз застосовується для оцінки впливу різних чинників на мінливість досліджуваних параметрів, наприклад зональності у розподілі концентрацій різних компонентів у природному середовищі. Однофакторний дисперсійний аналіз полягає у розділенні сукупності з n вимірів досліджуваної ознаки на p груп за якимось фактором. Після розділення проводиться

розрахунок дисперсії між групами та в межах груп відповідно за формулами

$$S_1^2 = \frac{1}{p-1} \sum_{i=1}^p n_i (\bar{x}_i - \bar{x})^2, \quad (3.26)$$

$$S_2^2 = \frac{1}{n-p} \sum_{i=1}^p \sum_{j=1}^{n_i} (x_{ij} - \bar{x})^2. \quad (3.27)$$

Тут n_i і \bar{x}_i – кількість вимірювань і середнє значення показника в кожній групі, \bar{x} – середнє значення по всій сукупності. Якщо фактор, за яким було проведено розділення, не впливає на мінливість показника, то відношення дисперсій S_1^2 і S_2^2 буде розподілено за законом Фішера з $p-1$ і $n-p$ степенями вільності. Гіпотеза про вплив даного фактора відхиляється, якщо

$$\frac{S_1^2}{S_2^2} \leq F_{p-1, n-p, \alpha}, \quad (3.28)$$

де $F_{p-1, n-p, \alpha}$ – табличне значення розподілу Фішера для заданої надійної ймовірності та степенів вільності.

Приклад. Результати вимірювань вмісту азоту і фосфору в донних відкладах водоймищ на різних глибинах наведені в табл. 3.4. Значення на глибинах до 5 м одержані на основі 15 вимірів, у діапазоні глибин 5-15 м – 20 вимірів, на глибинах понад 15 м – 18 вимірів.

Таблиця 3.4

Середні значення вмісту азоту й фосфору
в донних відкладах (мг/дм³)

Компонент	Глибина, м			Середнє загальне \bar{x}	Дисперсія всієї вибірки S_1^2
	<5	5 – 15	>15		
<i>N</i> загальний	33,64	48,21	36,83	40,22	40,05
<i>P</i> загальний	1,82	2,37	3,21	2,50	0,38

Для азоту дисперсія між групами $S_2^2 = 1066,55$, тоді відношення S_1^2/S_2^2 дорівнює 26,63, що перевищує табличне значення $F_{2,50,0,05} = 19,47$. Отже, фактор глибини суттєво впливає на розподіл азоту в донних відкладах. Для фосфору дисперсія між групами $S_2^2 = 17,46$, тоді відношення S_1^2/S_2^2 дорівнює 53,28, що перевищує табличне значення $F_{2,50,0,05} = 19,47$. Отже, фактор глибини суттєво впливає також і на розподіл фосфору в донних відкладах.

При двофакторному аналізі досліджується одночасний вплив двох факторів. Приклади його застосування містяться у [10].

Питання для самоконтролю

1. Сформулюйте приклади статистичних гіпотез щодо якості підземних та поверхневих вод, динаміки гідрогеологічного та гідрохімічного режиму.

2. Відповідно до наведених прикладів охарактеризуйте помилки першого та другого роду в цих гіпотезах.

3. Що характеризують надійні ймовірності?

4. За якими критеріями перевіряється вид розподілу вибірки?

5. Розкрийте поняття однорідності вибірки?

6. Яким чином відокремлюються аномальні значення з вибірки?

7. Як перевіряється гіпотеза про рівність середніх значень двох вибірок?

8. Для чого використовується критерій Фішера?

9. Які величини порівнюються при однофакторному дисперсійному аналізі?

Задача

Користуючись прикладами статистичних оцінок, наведеними у розділі, для двох заданих вибірок перевірити їхню однорідність, рівність середніх значень та дисперсій.

3.3. Визначення зв'язків між експериментальними даними

Лінійна регресія. Нелінійна регресія. Оцінка надійності рівняння регресії. Зв'язки між експериментальними даними. Кореляційне поле. Коефіцієнт кореляції. Значимість коефіцієнта парної кореляції.

Позначимо через x_i значення незалежної змінної (наприклад, часу, довжини) і через y_i – значення вимірюваної величини, одержані при відповідних x_i . Необхідно за парами даних (x_i, y_i) , $i=1, \dots, n$, (n – кількість вимірювань) побудувати залежність $y(x)$, яка б найточніше описувала результати експерименту, при цьому мінімально відхилялася від експериментальних значень. Для цього можна використовувати різні види залежностей. За рівнянням $y(x)$ можна передбачити значення вимірюваної величини поза межами інтервалу $[x_0, x_n]$.

Лінійна регресія. Головна вимога до виду функції – її лінійність за параметрами a і b , отже, даний метод застосовний також для рівнянь типу $y = a + bx^2$ і т. п.

Рівняння регресії будемо у вигляді

$$y = a + bx. \quad (3.29)$$

Лінія регресії проводиться так, щоб сума квадратів відхилень уздовж осі Oy була б мінімальною, отже,

$$U(a, b) = \sum_{i=1}^n (y_i - (a + bx_i))^2 = \sum_{i=1}^n (\Delta y_i)^2 \rightarrow \min. \quad (3.30)$$

Мінімум функції $U(a, b)$ досягається в точках, де її похідні дорівнюють нулю. Тоді можна скласти систему двох рівнянь відносно невідомих параметрів a і b :

$$\frac{\partial U}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial U}{\partial b} = 0.$$

Вирішуючи її, знайдемо a і b у вигляді

$$a = \frac{\left(\sum_{i=1}^n y_i\right)^2 \left(\sum_{i=1}^n x_i^2\right) - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right) \left(\sum_{i=1}^n x_i y_i\right)}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)^2},$$

$$b = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i y_i - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right) \left(\sum_{i=1}^n y_i\right)}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)^2}. \quad (3.31)$$

Вільний член a дорівнює відстані від початку координат до точки перетину лінії регресії з віссю Oy . Якщо $a = 0$, то лінія регресії проходить через початок координат.

Коефіцієнт b дорівнює тангенсу кута нахилу лінії регресії до осі Ox (рис. 3.5). Фактично пряма проводиться через «хмару» точок. Якщо зв'язок функціональний (детермінований), то всі точки лежать на одній прямій (лінії регресії). Інакше, зв'язок між x_i і y_i є стохастичним (імовірнісним). Так, якщо $y_i = k x_i$ для всіх $i = 1, \dots, n$, то

$$b = \frac{n \sum_{i=1}^n x_i k x_i - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right) \left(\sum_{i=1}^n k x_i\right)}{n \sum_{i=1}^n x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^n x_i\right)^2} = k.$$

Крім прямої регресії, може бути побудована зворотна регресія як залежність $x(y)$. Вибір типу регресії визначається тим, яка з величин є незалежною змінною, або зручністю побудови апроксимуючої залежності. Формули для визначення коефіцієнтів зворотної регресії будуть аналогічні з відповідною заміною індексів.

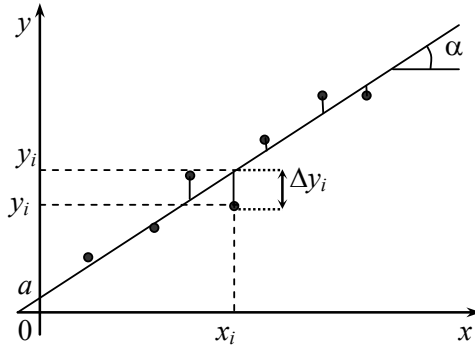


Рис. 3.5. Графік вибірки та рівняння регресії

Нелінійна регресія. У деяких випадках вимірювана величина може бути більш точно передбачена за допомогою нелінійного рівняння. Як приклад розглянемо квадратичну регресію, рівняння якої має вигляд $y = a + bx + cx^2$.

Користуючись принципом мінімуму суми квадратів відхилень уздовж осі Oy , складемо функцію

$$U(a, b, c) = \sum_{i=1}^n [y_i - (a + bx_i + cx_i^2)]^2. \quad (3.32)$$

Мінімум $U(a, b, c)$ і коефіцієнти a , b і c знайдемо, вирішуючи систему рівнянь [13]

$$\frac{\partial U}{\partial a} = 0, \quad \frac{\partial U}{\partial b} = 0, \quad \frac{\partial U}{\partial c} = 0.$$

Аналогічно можна побудувати рівняння регресії у вигляді багаточлена більш високого степеня.

Але збільшення степеня не завжди виправдане, бо ускладнює обчислення і часто не відповідає фізичній природі описуваного процесу. Тому на практиці часто використовуються експоненціальна $y = ae^{bx}$, логарифмічна $y = a + b \lg x$ і степенева залежності $y = ax^b$.

Параметри експоненціальної регресії можна визначити на основі формул (3.31), замінюючи змінні. Нехай, наприклад,

експериментальним даним відповідає залежність $y = ae^{bx}$. Тоді, позначивши $z = \ln y$, отримаємо рівняння $z = \ln a + b x$ або $z = a_0 + b x$. Це рівняння вже є лінійним за параметрами a_0 і b , тому для їх оцінки можна застосувати метод найменших квадратів за формулами (3.30), (3.31).

Приклад. Експериментальні дані відносно динаміки затоплення шахти у центральній частині Криворізького басейну показані точками на рис. 3.6. Для апроксимації змін рівня шахтних вод (глибини від поверхні землі z) та водоприпливу до підземних виробок з часом використані лінійна та експоненціальна апроксимації. Вірогідність обох апроксимацій доволі висока, хоча з фізичної точки зору обґрунтованою є експоненціальна залежність, яка відтворює уповільнення динаміки затоплення з часом.

Для визначення залежності між умістом сульфатів та сухим залишком у підземних водах на основі даних табл. 3.2 використані різні види залежностей (рис. 3.7). Формально достовірнішою є степенева та квадратична регресії, для яких показник R^2 більший, ніж для лінійної регресії. Але в умовах малого об'єму вибірки більш обґрунтованим є вибір лінійної залежності, оскільки без додаткових досліджень не існує чинників на користь вибору нелінійної регресії.

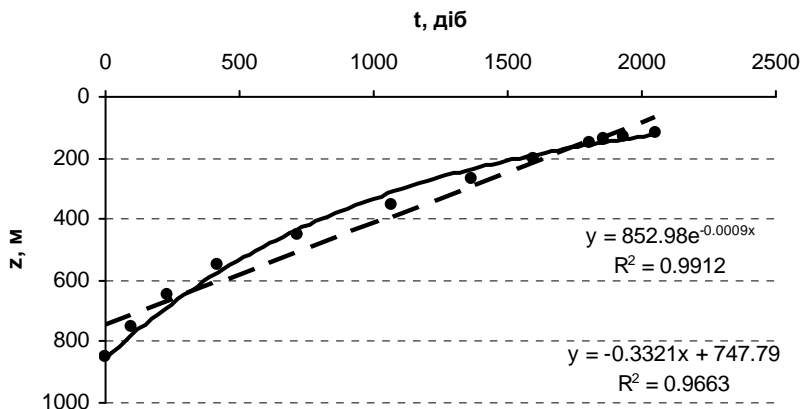
Оцінка надійності рівняння регресії. Для оцінки статистичної значущості рівняння регресії в цілому використовується критерій Фішера. Згідно з цим критерієм загальна дисперсія вибірки

$$S_y^2 = \frac{1}{n-1} \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2$$

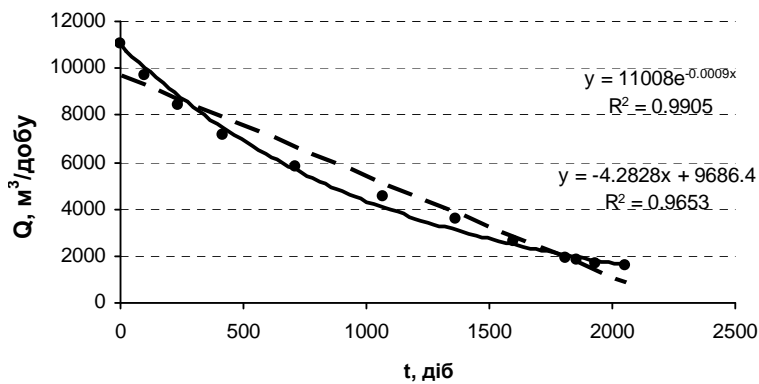
порівнюється з дисперсією залишків

$$S_{y,r}^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (y_i - y(x_i))^2 = \frac{1}{n-2} \sum_{i=1}^n (\Delta y_i)^2.$$

Загальна дисперсія характеризує ступінь відхилення значень y_i від середнього значення вибірки, дисперсія залишків – відхилення точок від лінії регресії. Чим ближче точки розташовані до середнього значення (лінії регресії), тим менша загальна дисперсія (дисперсія залишків).



a)



б)

Рис. 3.6. Апроксимація експериментальних даних динаміки затоплення шахти у часі: а – глибина рівня води від поверхні землі, б – водоприплив (суцільна крива – експоненціальна залежність, штрихова – лінійна)

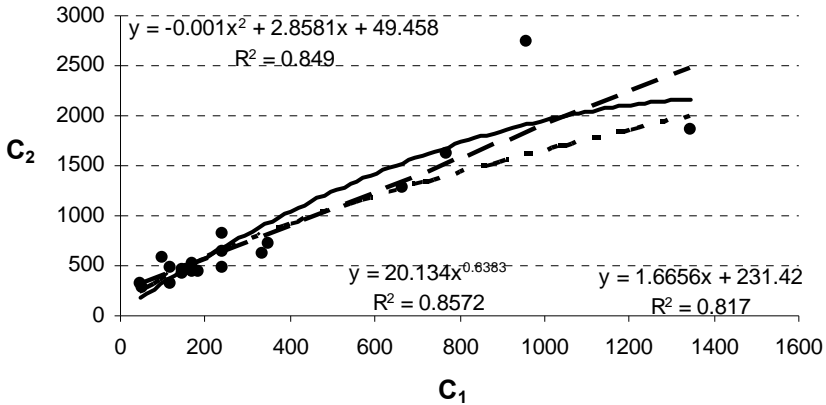


Рис. 3.7. Апроксимація залежності між умістом сульфатів C_1 та сухим залишком C_2 на основі гідрохімічних даних (табл. 3.2): суцільна крива – параболічна залежність, штрихова – лінійна, штрих-пунктирна – степенева

Згідно з критерієм Фішера обчислюється величина

$$F = S_y^2 / S_{y,r}^2, \quad (3.33)$$

яка порівнюється зі значенням $F_{n-1,n-2,\alpha}$ з розподілу Фішера.

Якщо $F > F_{n-1,n-2,\alpha}$, то з імовірністю $(1 - \alpha)$ можна стверджувати, що побудоване рівняння регресії статистично значуще. У цьому випадку дисперсія залишків статистично менша від загальної дисперсії, тобто побудоване рівняння регресії краще описує зв'язок між даними, ніж середнє сталє значення. Якщо $F < F_{n-1,n-2,\alpha}$, то середнє значення у більшій мірі відповідає даним, ніж побудоване рівняння регресії.

Для коефіцієнта регресії b можна перевірити «нуль-гіпотезу», або твердження про те, що коефіцієнт b суттєво відрізняється від нуля. Ця перевірка має сенс при малих значеннях b , тобто при малому куті нахилу прямої регресії. Згідно з критерієм Стьюдента обчислюється величина

$$t = |b| / S_b, \quad (3.34)$$

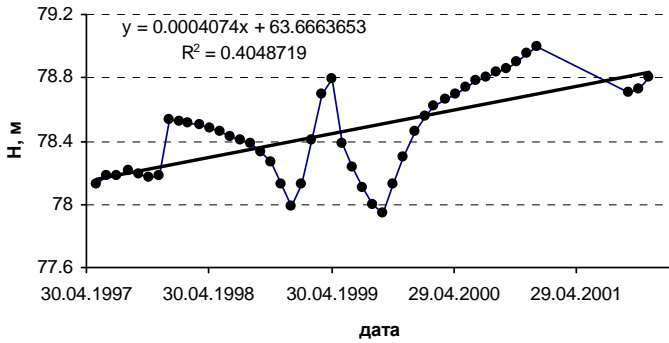
де

$$S_b = \sqrt{\frac{Q_y - bQ_{xy}}{(n-2)Q_x}}, \quad Q_{xy} = \sum_{i=1}^n x_i y_i - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n x_i \right) \left(\sum_{i=1}^n y_i \right),$$
$$Q_x = \sum_{i=1}^n x_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n x_i \right)^2, \quad Q_y = \sum_{i=1}^n y_i^2 - \frac{1}{n} \left(\sum_{i=1}^n y_i \right)^2. \quad (3.35)$$

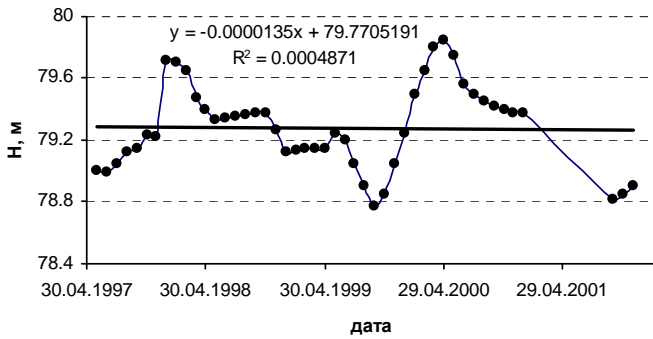
Чим більший розкид значень відносно коефіцієнта b , тим більше S_b і менше t з розподілу Стьюдента. Величина t порівнюється зі значенням $t_{n-1, n-2, \alpha}$. Якщо $t > t_{n-1, n-2, \alpha}$, то коефіцієнт регресії статистично значущо відрізняється від нуля, тобто значення b достатньо велике, а розкид значень при його оцінці відносно малий. Якщо $t < t_{n-1, n-2, \alpha}$, то коефіцієнт регресії настільки малий, що правомірно прийняти його рівним нулю.

Приклад. Для часових рядів коливань рівня води у двох свердловинах протягом кількох років за допомогою програми Excel побудовані лінійні регресії (рис. 3.8). Аналіз достовірності рівнянь регресії (табл. 3.5) за критерієм Фішера показує, що рівняння регресії для свердловини «2а» є статистично значущим, тоді як середнє значення рівня підземних вод у свердловині «4р» краще описує дані, ніж рівняння регресії. Це узгоджується з суттєвою різницею значень коефіцієнта достовірності R^2 для обох рівнянь регресії.

Зв'язки між експериментальними даними. Зв'язок між показниками стану природного середовища, параметрами гірських порід тощо може бути функціональним чи стохастичним. Функціональний зв'язок означає, що існує однозначна відповідність значень одного параметра значенням іншого параметра. Але переважна більшість показників стану навколишнього середовища є результатом ланцюга складних, часто взаємопов'язаних процесів (підрозділ 1.1), тому встановити такі залежності практично неможливо. Крім того, слід враховувати помилки в експериментальних даних за рахунок методики досліджень, похибок вимірювань, відбору, зберігання та аналізу проб тощо. Таким чином, через неможливість точного опису всіх причинно-наслідкових ланцюгів виникають імовірнісні зв'язки між параметрами, які досліджуються за допомогою розподілів випадкових величин.



а)



б)

Рис. 3.8. Побудова лінійної регресії часових рядів коливання рівня підземних вод у свердловинах: а) «2а», б) «4р»

Таблиця 3.5
Аналіз достовірності рівнянь регресії (рис. 3.8) за критерієм Фішера

№ св.	Середнє \bar{y}	Дисперсія S_y^2	Дисперсія вибірки	F	$F_{47,46,0,05}$	Висновок
2а	78,45	0,082	0,049	1,68	1,61	Статистично значуще
4р	78,28	0,074	0,074	1,0	1,61	Статистично не значуще

У разі стохастичного зв'язку одному значенню показника відповідає декілька значень іншого, причому з різною ймовірністю. Для гідрохімічних показників характерні саме стохастичні зв'язки, оскільки, наприклад, концентрація деякого компонента у природних водах залежить як від чинників, характерних лише для нього, так і від чинників загальних для всіх компонентів. Кількісно зв'язки між показниками процесів у природних водах характеризуються тенденціями або трендами.

У гідрохімічних дослідженнях (наприклад, встановленні зв'язку між мінералізацією підземних та річкових вод, вмістом певних компонентів у природних водах) необхідно виявити саме таку тенденцію або декілька трендів, довести її статистичну значущість, зробити прогноз впливу однієї величини на іншу. Якщо відома поведінка одного з параметрів, то можна передбачити поведінку іншого, якщо з ним є певний зв'язок. Крім того, можна підібрати ознаки для проведення класифікації. Для цього й використовуються методи кореляційного аналізу.

Кореляційне поле. Слід зважати на те, що обчислення коефіцієнтів кореляції є суто технічною процедурою, яку потрібно обґрунтувати відповідним аналізом природних умов. Необхідно, щоб компоненти, між якими встановлюється кореляційний зв'язок, спостерігались одночасно або в тих самих пунктах. Так, коректні коефіцієнти кореляції між вмістом різних компонентів можна встановити за пробами в тих самих свердловинах, створах ріки тощо.

Наочне уявлення про наявність або відсутність зв'язку між різними параметрами дає кореляційне поле, приклади якого наведені на рис. 3.9. Координати точок відповідають парам значень « x – y » вмісту двох компонентів у природних водах і утворюють «хмару». За формою цієї «хмари» можна зробити висновок щодо зв'язку між компонентами. На рис. 3.9, а показана позитивна кореляція, коли при зростанні одного показника зростає й значення іншого. У разі зворотної кореляції (рис. 3.9, б) зростання одного показника супроводжується зменшенням іншого. Хмара точок на рис. 3.9, в є типовою для нульової кореляції, коли зв'язок між рядами даних відсутній. Слід зважати, що кореляція залежить від масштабу змінних на осях. Чим більш вузькою є «хмара» точок, тим тіснішим є зв'язок між даними. Кількісно він характеризується таким параметром, як коефіцієнт кореляції.

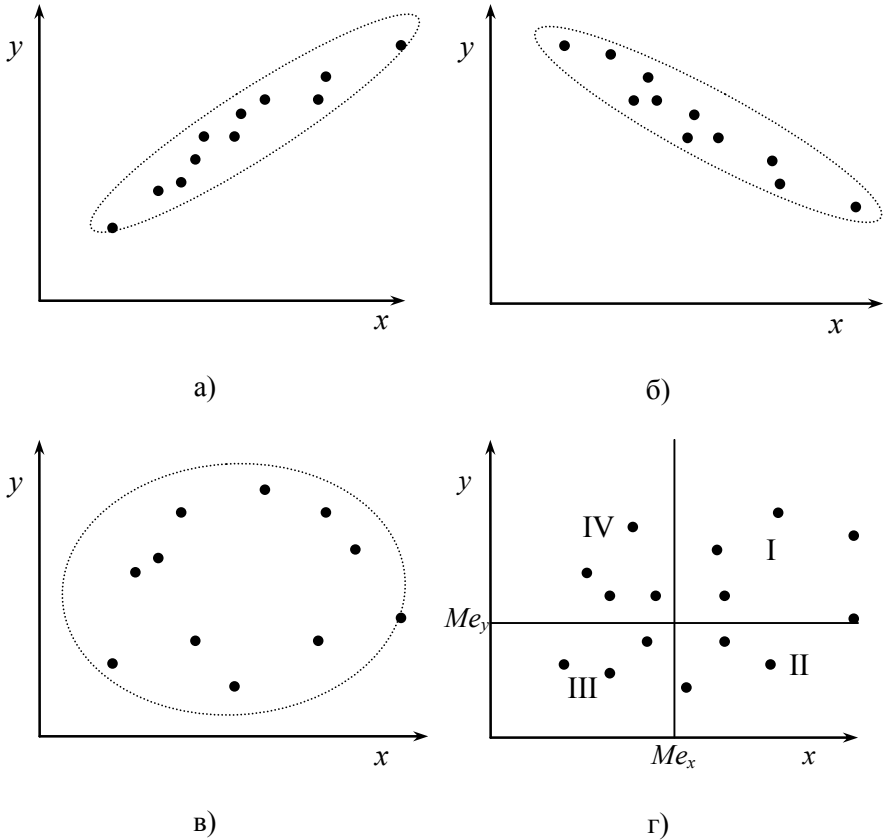


Рис. 3.9. Види кореляційного поля: а) прямий зв'язок між даними, б) зворотний зв'язок, в) зв'язок відсутній, г) схема до наближеного визначення коефіцієнта кореляції

Коефіцієнт кореляції. Коваріація або кореляційний момент являє собою математичне сподівання добутків відхилень компонент від їхніх математичних сподівань. Для двох рядів незалежно отриманих результатів вимірювань x_i та y_i , $i=1, \dots, n$, можна визначити коваріацію у вигляді

$$\text{cov}(x, y) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y}). \quad (3.36)$$

Для тих же рядів результатів коефіцієнт кореляції визначається у вигляді

$$r = \frac{\text{cov}(x, y)}{\sigma_x \sigma_y}, \quad (3.37)$$

після проведення спрощень

$$r = \frac{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})(y_i - \bar{y})}{\sqrt{\sum_{i=1}^n (x_i - \bar{x})^2 \sum_{i=1}^n (y_i - \bar{y})^2}}. \quad (3.38)$$

Якщо існує функціональна залежність y_i від x_i з коефіцієнтом $k > 0$, то $y_i = kx_i$, при цьому $r = 1$. Якщо ж коефіцієнт $k < 0$, то $r = -1$, тобто між x_i та y_i існує зворотний зв'язок. У разі $r = 0$ залежність між x_i та y_i відсутня. Отже, коефіцієнт кореляції змінюється в діапазоні $[-1, 1]$ за будь-яких результатів вимірювань. Якщо r ближче до 1 або до -1 , але менше по модулю за граничні значення, то можна стверджувати, що існує пряма або зворотна стохастична залежність між рядами даних.

Наближену оцінку коефіцієнта кореляції можна отримати графічно (рис. 3.9, г), використовуючи формулу

$$r = \frac{n_1 - n_2}{n_1 + n_2}, \quad (3.39)$$

де n_1 – кількість точок (пар спостережень) у квадрантах I та III, n_2 – кількість точок у квадрантах II та IV.

Значущість коефіцієнта парної кореляції r може бути перевірена за описаним далі критерієм. Величина

$$t = \frac{r\sqrt{n-2}}{\sqrt{1-r^2}} \quad (3.40)$$

порівнюється зі значенням $t_{n-2, \alpha}$ з розподілу Стьюдента. Якщо $t > t_{n-2, \alpha}$, то гіпотеза про те, що $r = 0$ (коефіцієнт кореляції дорівнює нулю) відхиляється, тобто зв'язок між порівнюваними

рядами даних існує. Інакше, можна вважати, що зв'язку між даними немає.

Нехай, наприклад, за результатами 42 випробувань отриманий коефіцієнт кореляції 0,17. Тоді, порівнюючи $t \approx 1,2$ зі значеннями $t_{40,0,1} \approx 1,3$ і $t_{40,0,05} \approx 1,69$, переконуємося, що навіть при більш «м'якому» критерії ($\alpha = 0,1$) гіпотезу про наявність зв'язку між даними слід відкинути.

Крім величини (3.40), для оцінки статистичної значущості коефіцієнта кореляції може бути використана також величина

$$t = \left(\frac{1}{2} \ln \left(\frac{1+r}{1-r} \right) - \frac{|r|}{2(n-1)} \right) \sqrt{n-3},$$

яка порівнюється з табличним значенням з розподілу Стьюдента.

Ступінь кореляційної залежності між двома рядами даних можна охарактеризувати графічно (рис. 3.10). Тут $b_1 = \operatorname{tg} \alpha_1$, $b_2 = \operatorname{tg} \alpha_2$, причому $\beta = 90^\circ - (\alpha_2 - \alpha_1)$. Чим вужчий кут між прямими регресії, тим тісніший зв'язок існує між рядами даних.

Коефіцієнт кореляції надійно характеризує зв'язок між даними лише в умовах лінійного рівняння регресії, тобто «у середньому». Але, наприклад, у різних діапазонах концентрації деяких компонентів характер залежності між ними може суттєво змінюватися.

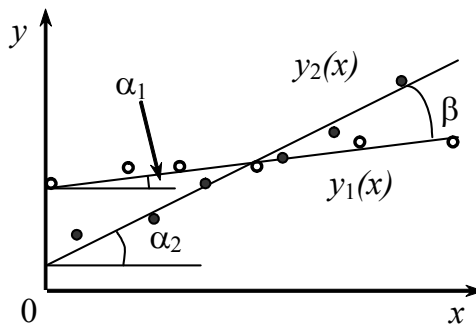


Рис. 3.10. Геометрична характеристика кореляційної залежності

Так, для слабких розчинів існує лінійна залежність між концентрацією речовини у розчині та у сорбенті. При високих концентраціях, коли практично вся ємність сорбенту вичерпана, лінійний зв'язок між цими величинами порушується. Зміна коефіцієнта кореляції у різних діапазонах параметрів може виникнути і через неправильне групування даних, геометричні похибки тощо.

Питання для самоконтролю

1. За яким принципом будується лінія регресії?
2. Поясніть геометричний зміст коефіцієнтів регресії.
3. Охарактеризуйте найбільш поширені види регресії. Як перейти від нелінійної до лінійної регресії?
4. Як перевіряється статистична значущість рівняння регресії?
5. Чому неможливо зі 100 %-ною надійністю описати всі зміни параметрів стану природного середовища?
6. Розкрийте поняття «стохастичний зв'язок між даними».
7. Що включає кореляційне поле?
8. Які висновки про зв'язок між даними можна зробити на основі візуального аналізу кореляційного поля?
9. Які висновки про зв'язок між даними можна зробити на основі аналізу коефіцієнта кореляції та його достовірності?
10. Як перевіряється статистична значущість коефіцієнта кореляції?
11. Розкрийте геометричний зміст коефіцієнта кореляції.

3.4. Деякі практичні застосування статистичних методів у гідроекології

Визначення гідрохімічного фону. Визначення оптимальної кількості проб. Статистичний аналіз часових рядів. Визначення закономірностей методом тренд-аналізу.

Визначення гідрохімічного фону є однією з важливих задач досліджень розподілу компонентів у природних водах. Від

правильного визначення фонових та аномальних значень залежить об'єктивність інтерпретації даних гідрогеоecологічного моніторингу.

Гідрохімічним фоном називають вміст компонентів у водах, що не пов'язаний з аномаліями. Але навіть за їх відсутності вміст компонентів коливається у певних межах. Тому існують декілька способів визначення гідрохімічного фону як певного діапазону значень із заданою надійною імовірністю.

Якщо встановлено, що розподіл компонентів описується нормальним законом, то значення C , які відносяться до гідрохімічного фону, належать інтервалу

$$C = \bar{C} \pm a(p)\sigma, \quad (3.41)$$

де \bar{C} та σ – оцінки середнього арифметичного та середнього квадратичного відхилення у вибірці концентрації; $a(p)$ – значення аргументу нормованої функції Лапласа, що залежить від прийнятої надійної ймовірності p (табл. 3.6).

Таблиця 3.6

Параметри для визначення надійного інтервалу
на основі нормального розподілу

p	0,95	0,99	0,9973
$a(p)$	1,96	2,58	3,0

Для вибірок об'ємом до 30 використовується значення з t -розподілу Стьюдента.

Приклад. Для вибірки обсягом $n = 52$ визначені середнє арифметичне $\bar{C} = 0,45$ мг/л та середнє квадратичне відхилення $\sigma = 0,12$ мг/л для вмісту хлору в пробах річкової води. При використанні 95 %-ної надійної ймовірності гідрохімічним фоном буде діапазон

$$C = 0,45 \pm 1,96 \cdot 0,12 = 0,45 \pm 0,24 \text{ мг/л,}$$

тобто мінімальне значення фону становитиме 0,21 мг/л, а максимальне – 0,69 мг/л. При використанні надійної ймовірності 99 % гідрохімічним фоном буде інтервал $C = 0,45 \pm 0,31$ мг/л з нижньою границею 0,14 мг/л і верхньою – 0,76 мг/л. Для найбільшої

надійної ймовірності 99,73 % гідрохімічним фоном буде інтервал від 0,09 до 0,81 мг/л.

Якщо вибірковий розподіл описується логнормальним законом, то для розрахунків використовуються формули

$$\lg C = \lg \bar{C} \pm a(p) \lg \sigma, \quad (3.42)$$

а при $n > 30$ –

$$\lg C = \lg \bar{C} \pm t_{\alpha} \lg \sigma. \quad (3.43)$$

Визначення оптимальної кількості проб. Об'єктивність гідрохімічних досліджень залежить від правильного вибору методики. Одним з її важливих питань є визначення оптимальної (необхідної) кількості проб, за якою можна надійно характеризувати розподіл хімічного складу природних вод.

Необхідна точність результатів досліджень залежить від поставлених задач, а точність кількісного визначення компонентів хімічного складу має відповідати точності кінцевих результатів. Наприклад, обґрунтування можливості використання води для іригації потребує менше проб, ніж аналогічний висновок щодо питного водопостачання. Для складання сольового балансу водних об'єктів достатньо дотримуватися точності 15–20 %, з якою визначається водний баланс; підвищення точності оцінок сольового балансу до 1–2 % є нераціональним, а її зниження до 30 % – необґрунтованим і недоцільним.

Слід брати до уваги суб'єктивний чинник у визначенні оптимальної кількості проб для кожного конкретного об'єкта. При зниженні кількості проб результати можуть виявитися недостатньо обґрунтованими, а їх використання стане некоректним. З іншого боку, завищення кількості проб збільшує витрати на експериментальні дослідження.

Для оцінки раціональної кількості проб, крім місцевих умов, слід визначити:

- 1) рівні статистичної значущості (надійності) висновків,
- 2) мінливість вимірюваного показника (стандартне відхилення).

В гідрохімічних дослідженнях зазвичай використовуються рівні значущості 5–10 %, отже, надійність таких висновків сягає 90–95 %.

Мінливість гідрохімічних показників наперед невідома, але може бути оцінена за літературними джерелами для аналогічних умов; дисперсію можна визначити статистичною обробкою попередніх результатів експериментальних досліджень.

У разі нормального розподілу компонента у вибірці раціональна кількість проб N визначається за формулою

$$N = \left(\frac{t_{\alpha} \sigma}{\Delta x} \right)^2, \quad (3.44)$$

де t_{α} – значення t -розподілу Стьюдента при заданому рівні значущості α ; σ – вибіркова оцінка середнього квадратичного відхилення; Δx – заданий рівень похибки середнього в абсолютних значеннях.

Якщо приймається 5 %-ний рівень значущості, то за табл. 3.6 відповідне значення $t_{\alpha} = 1,96$ (можна прийняти $t_{\alpha} \approx 2,0$). Отже,

$$N \approx \frac{4 \sigma^2}{(\Delta x)^2} = 4 \frac{v^2}{\delta^2}, \quad (3.45)$$

де v – коефіцієнт варіації; δ – допустима відносна похибка середнього значення.

Зазначимо, що вплив варіативності вибірки (параметра v) більш суттєвий для нестійких речовин і мікрокомпонентів; для них зазвичай потрібно більше аналізів. Для макрокомпонентів вплив помилок аналізу буде менший.

Приклад. Припустимо, що розподіл хлору в поверхневих водах описується нормальним законом. Для річкових вод попередньо отримані такі оцінки: $\bar{C} = 28$ мг/л, $\sigma = 14$ мг/л. Приймаємо надійність висновків 95 %, а допустиму відносну похибку – 10 %. Тоді у формулу (3.45) підставимо числові значення і знайдемо оптимальну кількість проб

$$N = \frac{4 \cdot 14^2}{(0,1 \cdot 28)^2} = 100.$$

Якщо рівень допустимої відносної помилки знизити до 20 %, то N можна зменшити до 25.

Статистичний аналіз часових рядів. Останнім часом для дослідження гідрогеоекологічних та геотехнічних процесів поширюється використання датчиків (сенсорів), які встановлюються у певних контрольних точках і в режимі реального часу вимірюють та передають на станцію моніторингу важливі показники досліджуваного об'єкта. При моніторингу поверхневих та підземних вод вимірюються, зокрема, такі показники: швидкість течії, температура, вміст зважених частинок, кисню, сполук азоту, фосфору, синьо-зелених водоростей тощо. Таким чином, формуються великі масиви даних у вигляді часових рядів, які характеризують тривалі зміни стану водного об'єкта.

Тому задача коректної статистичної обробки часових рядів стає більш актуальною. Наявність такої інформації суттєво підвищить достовірність математичних моделей міграції (розділи 1 і 2), забезпечить коректне визначення їх параметрів. Важливим аспектом такої обробки є визначення середніх значень та середніх квадратичних відхилень на всьому інтервалі вимірювань чи його частині.

Відомо, що на результати вимірювань впливає багато чинників, причому вплив частини з них неможливо достовірно оцінити. Тому числовий ряд

$$x_i = X(t_i) \quad (3.46)$$

розглядається як деяка реалізація випадкового процесу, що генерується вимірювальним датчиком.

Позначимо через τ період спостережень. Середнє значення може бути визначено як для всього періоду спостережень, так і для його частини t , суттєво меншій за τ , наприклад, для окремого дня або тижня з періоду, тривалішого, ніж місяць або рік.

Найпростішим способом є визначення середнього значення для рівновіддалених моментів часу:

$$\bar{x}_r = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N X(i\Delta t), \quad (3.47)$$

де N – кількість вимірювань; Δt – проміжок часу між ними, $\tau = N \Delta t$. Оцінка (3.47) є коректною, якщо під час періоду спостережень не

формується певний тренд і значення показника несуттєво відхиляються від середнього значення.

У разі, коли вимірювання проводилися нерегулярно у часі, тобто через різні його проміжки, при цьому розподіл показника вважається симетричним, то середнє \bar{x}_d згідно з діапазоном можна визначити на основі оцінок розмаху вимірюваних значень:

$$\bar{x}_d = \bar{x}_r + (\Delta x_{min} - \Delta x_{max})/2, \quad (3.48)$$

де \bar{x}_r – середнє, визначене звичайним способом; Δx_{min} та Δx_{max} – найбільші відхилення у бік мінімуму та максимуму відповідно.

Часто потрібно врахувати попередні оцінки середніх значень, корегуючи їх новими порціями даних, обсяг яких менший за обсяг уже наявних даних. Тоді скореговане середнє значення визначається за формулою

$$\bar{x}_{12} = \bar{x}_1 \frac{n_1}{n_1 + n_2} + \bar{x}_2 \frac{n_2}{n_1 + n_2}, \quad (3.49)$$

де \bar{x}_1 – середнє значення за попередній період, визначене на основі n_1 вимірювань, \bar{x}_2 – середнє значення у новий період спостережень на основі n_2 вимірювань. Так можна корегувати середні багаторічні значення показників, базуючись на спостереженнях останніх кількох років.

Для згладжування «піків» у часовому ряду використовується так зване ковзне середнє. Для кожного i -го моменту часу воно визначається усередненням k значень за попередній, порівняно короткий проміжок часу:

$$\bar{x}_{ik} = \frac{1}{k} \sum_{j=i-k+1}^i \bar{x}_j. \quad (3.50)$$

При цьому значення часового ряду можуть підсумовуватися з певними ваговими коефіцієнтами. Приклад усереднення на основі п'яти попередніх значень (рис. 3.11) показує, що згладжений тренд повторює основний з певним запізненням, що створює «ефект інерції».

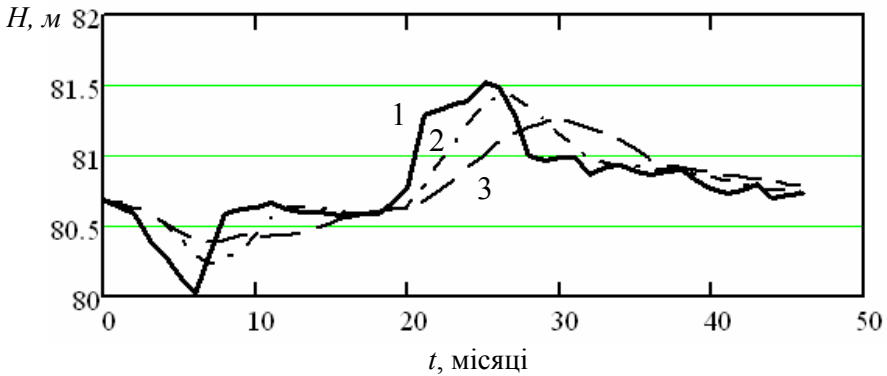


Рис. 3.11. Коливання рівня підземних вод у свердловині:
 1 – значення рівня води, 2 – крива на основі ковзного середнього з 5 попередніх значень, 3 – крива на основі ковзного середнього з 10 попередніх значень

Для визначення середнього квадратичного відхилення σ_t часових рядів з рівновіддаленими моментами вимірювань застосовна звичайна формула (3.5).

У разі великого обсягу вибірки можна також застосовувати формулу

$$\sigma_t = \frac{\Delta_{max}}{2\beta},$$

де Δ_{max} – розмах вибірки, тобто різниця між її максимумом та мінімумом; β – коефіцієнт, що змінюється від 2 до 3 залежно від об'єму вибірки.

Визначення закономірностей методом тренд-аналізу. За допомогою тренд-аналізу перевіряються гіпотези щодо закономірностей просторових змін досліджуваних показників та виокремлюються їх локальні аномалії. Зокрема, за результатами вимірювань пористості та проникності кількісно характеризується неоднорідність водоносного горизонту. Вхідними даними для виконання одновимірного тренд-аналізу є послідовності значень,

упорядковані вздовж певного профілю y_i , $i = 1, \dots, N$, приклад яких наведений на рис. 3.12.

Точкою зміни знаку в упорядкованій послідовності називається такий елемент, де зростання ознаки змінюється на убавання або навпаки. У випадкових послідовностях кількість точок зміни знаку n_c залежить від кількості елементів, у невідповідних на число n_c впливають закономірні чинники і воно відрізняється від математичного сподівання. При $N > 10$ статистичний розподіл числа n_c близький до нормального з математичним сподіванням та дисперсією відповідно [10]

$$M_c = \frac{2N - 4}{3}, \quad \sigma_c^2 = \frac{16N - 29}{90}. \quad (3.51)$$

Для перевірки гіпотези про наявність тренду у вибірці слід визначити кількість точок зміни знаку, після чого обчислюється критерій

$$Z = \frac{n_c - M_c}{\sqrt{\sigma_c^2}}, \quad (3.52)$$

згідно з яким на основі табличних значень нормованої функції нормального розподілу [10] визначається ймовірність такої послідовності. Якщо ця ймовірність дуже мала і не перевищує задану критичну ймовірність (наприклад 0,05), то гіпотеза про випадковий характер зміни знаків відкидається, тобто у досліджуваній послідовності існує тренд.

Приклад. За результатами вимірювань пористості (рис. 3.12) визначено число зміни знаків, яке дорівнює 13. Математичне сподівання кількості зміни знаків $M_c \approx 18,7$ та його дисперсія $\sigma_c \approx 0,5$ при $N = 30$. Обчислений за формулою (3.52) критерій Z дорівнює $-2,55$. Згідно з таблицею нормального розподілу [10] такому значенню відповідає ймовірність 0,0054, що суттєво менше, ніж 0,05. Таким чином, гіпотеза про випадковий характер змін пористості відкидається, і висновок щодо існування тренду вздовж профілю є правомірним.

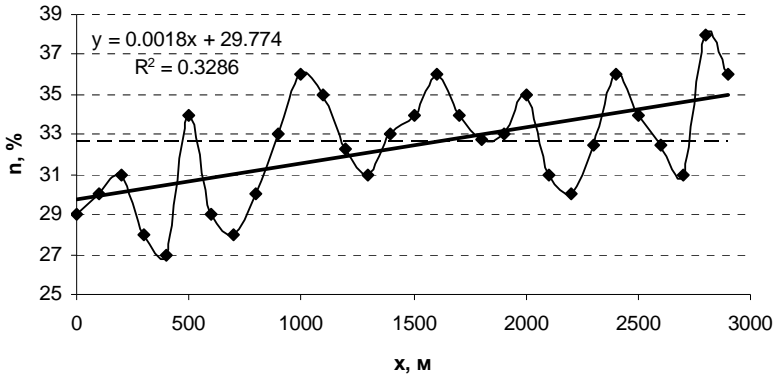


Рис. 3.12. Зміна пористості n уздовж профілю:
ламана лінія з точками – значення вимірювань,
штрихова – медіана послідовності, жирна – можливий тренд

Інший спосіб перевірки тренду передбачає визначення так званих «стрибків» – інтервалів послідовності, у межах яких відбувається лише зростання або зменшення показників, тобто знак змін залишається однаковим. Наприклад, послідовність «+ + - + + - - - + -» можна поділити на 6 стрибків: «+ +», «-», «+ +», «- - -», «+», «-».

Всі елементи числової послідовності поділяються на дві групи: менші за медіану Me (позначені «-») та більші за неї (позначені «+»). Розподіл кількості стрибків при зростанні об'єму вибірки наближається до нормального з середнім M_c та дисперсією σ_c , що визначаються за формулами:

$$M_c = \frac{2n_1n_2}{n_1 + n_2} + 1, \quad \sigma_c^2 = \frac{2n_1n_2(2n_1n_2 - n_1 - n_2)}{(n_1 + n_2)^2(n_1 + n_2 - 1)}, \quad (3.53)$$

де n_1 та n_2 – кількість елементів одного знаку («+» або «-»).

За таблицею нормального розподілу [10] визначається ймовірність значення, яке обчислюється за критерієм, що формально співпадає з (3.52), де n_c – кількість стрибків. Якщо ця ймовірність дуже мала і не перевищує критичного значення (наприклад, 0,05), то гіпотеза про випадковий характер послідовності відкидається і можна стверджувати, що вона містить тренд.

Приклад. Для послідовності, зображеної на рис. 3.12, кількість стрибків $n_c = 10$, кількість елементів «+» та «-» становить $n_1 = 15$, $n_2 = 15$. Згідно з формулами (3.53) при $N = 30$ визначено середнє значення та дисперсія відповідно $M_c = 16$, $\sigma_c = 7,24$. Значенню критерію $Z = -0,83$ за формулою (3.52) відповідає ймовірність 0,20, яка значно більша за критичну, що дорівнює 0,05. Таким чином, гіпотеза про випадковий характер послідовності не відкидається, тобто можна говорити про відсутність закономірності у даній послідовності. Такий висновок розходиться з тим, що був зроблений вище іншим варіантом тренд-аналізу. Дійсно, достовірність оцінюваного тренду є невисокою, тому з упевненістю стверджувати про його наявність неможливо.

Питання для самоконтролю

1. Чому поняття «гідрохімічний фон» має умовний характер?
2. Як змінюється надійний інтервал гідрохімічного фону у разі збільшення надійної ймовірності? Чому?
3. Як можна оцінити оптимальну чи раціональну кількість проб при гідрохімічних дослідженнях?
4. Яким чином залежить раціональна кількість проб від дисперсії вибірки та похибки вимірювань?
5. Які види середніх значень застосовуються при статистичному аналізі часових рядів?
6. Наведіть приклади можливого застосування тренд-аналізу в задачах гідрогеоєкології.
7. Як можна визначити наявність тренду у послідовності даних?

Задача

Користуючись останнім прикладом у тексті розділу, встановити, чи існує тренд у заданій викладачем вибірці.

Розділ 4

ВИКОРИСТАННЯ МАТЕМАТИЧНИХ МЕТОДІВ ПРИ ОБҐРУНТУВАННІ ПРИРОДООХОРОННИХ ЗАХОДІВ

4.1. Методи захисту підземних вод від забруднення

Природні бар'єри на шляху міграції токсичних речовин. Профілактичні заходи захисту підземних вод. Активні заходи і методи відновлення якості підземних вод.

Методи захисту підземних вод від забруднення включають такі заходи:

- пасивні – засновані на використанні природних бар'єрів,
- профілактичні – передбачають створення певних штучних бар'єрів на шляху міграції,
- активні – спрямовані на вилучення токсичних речовин з водоносного горизонту або їхню нейтралізацію.

Природними бар'єрами на шляху міграції токсичних речовин є геологічні структури, в яких відбувається зменшення концентрації токсичних речовин. Найважливіші чинники цього процесу:

- сорбція розчинних речовин гірськими породами;
- розсіювання речовин унаслідок гідродинамічної дисперсії;
- хімічна нейтралізація, радіоактивний розпад та біодеградація.

Використання природних бар'єрів може бути виправданим у разі невеликого за обсягом джерела забруднення підземних вод. При цьому необхідно мати адекватне уявлення про умови його виникнення та поширення забруднювальних речовин. Як правило, покладатися на захисні властивості природних бар'єрів можна у ситуаціях з невеликим ризиком, а також при наявності слаботоксичних речовин. Відмова від активного захисту доцільна також у випадку, коли вже відбулася міграція речовин у підземних водах. Умовою використання природних бар'єрів є незначний фільтраційний градієнт, низька інтенсивність водообміну та невелика проникність водоносних порід. Слід враховувати, що іноді продукти розпаду забруднювальних речовин виявляються більш токсичними, ніж початкові речовини.

У разі використання природних бар'єрів приймається концепція контрольованого забруднення, показники якого постійно

визначаються на основі регулярних спостережень. Якщо в результаті геоекологічного моніторингу та моделювання геоміграції встановлено ризик перевищення допустимих концентрацій, необхідно застосування засобів активного захисту.

Як приклад розглянемо міграцію радіоактивних речовин до водозабору (рис. 4.1, а). Під впливом сорбції швидкість міграції суттєво уповільнюється, а тривалість руху речовин до водозабору значно збільшується. В період тривалішої міграції внаслідок розпаду значна частина речовини не досягає водозабору. У випадку міграції короткоіснуючих елементів практично вся речовина може розпастися, не потрапивши до свердловини (рис. 4.1, б).

Профілактичні заходи захисту підземних вод включають штучні бар'єри, до яких належать:

- захисні екрани, що встановлюються у дніщі хвостосховищ, водовідстійників та накопичувачів;
- поверхневі покриття, які попереджують вітрову ерозію, розсіювання пилу, суттєво зменшують інфільтрацію до підземних сховищ відходів.

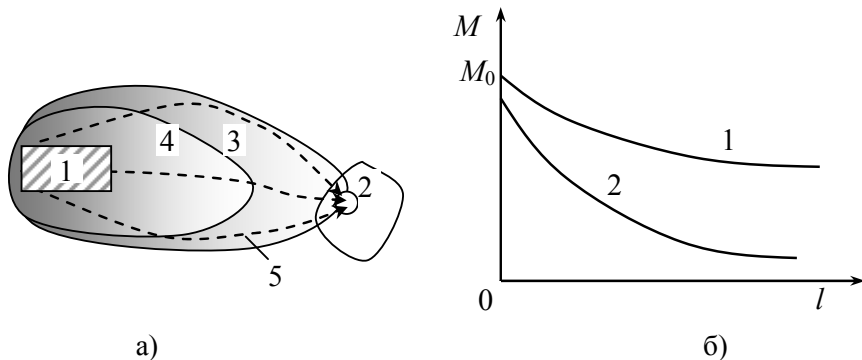
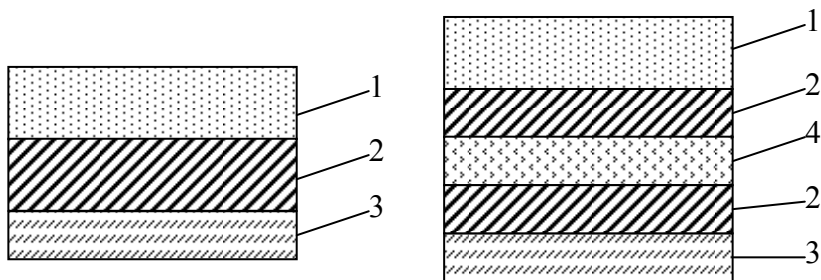


Рис. 4.1. Схема використання природних бар'єрів на шляху міграції до водозабору (а), де 1 – джерело речовин, 2 – водозабір, 3 – зона забруднення за відсутності розпаду, 4 – зона забруднення для речовини, що розпадається, 5 – шляхи міграції, та графік залежності кількості речовини, що потрапляє до водозабору залежно від відстані l між джерелом речовини та водозабором (б), де M_0 – початкова маса речовини, M – маса речовини, що потрапляє до водозабору, 1 – випадок, коли речовина не розпадається, 2 – коли речовина радіоактивна



а) б)

Рис. 4.2. Схеми одношарових (а) та двошарових (б) глинистих протифільтраційних екранів накопичувачів:
 1 – захисний ґрунтовий шар, 2 – ущільнений глинистий шар,
 3 – ґрунт основи, 4 – дренажний шар

Захисні екрани у днищі хвостосховищ та подібних об'єктів можуть бути жорсткими (бетон, залізобетон, асфальтобетон), пластичними (глини, ґрунти, глиноцементні суміші) та гнучкими (поліетиленові плівки). Типові схеми одно- та двошарових глинистих екранів наведені на рис. 4.2 [6].

Проникність глинистих екранів обмежується коефіцієнтом фільтрації 10^{-9} м/с, а їхня товщина має бути не меншою, ніж 60 см. Для зменшення проникності глини ущільнюють, що часто дає бажаний ефект. Товщина плівки, що застосовується в екранах, складає від 0,2 до 0,8 мм.

Стійкість екранів визначається:

- міцністю плівки,
- хімічною та механічною міцністю асфальтобетону або цементу,
- просадками порід та зміною їхньої проникності.

Проникність екранів, особливо глинистих, зростає на 1–2 порядки у разі зберігання агресивних стоків, наприклад, кислих або лужних рідких відходів.

Для зменшення проникності глин та збільшення їхньої стійкості та опору агресивним рідинам застосовують протифільтраційні завіси. Вони створюються нагнітанням глинистої, глиноцементної або цементної суміші у гравійних ґрунтах і пісках. Ці суміші мають легко

входити до породи, кольматувати пори та тріщини, віддавати воду. Як протифільтраційний засіб можлива бітумізація, яку доцільно використовувати в гравійно-галечникових та тріщинуватих породах.

Прикладом поверхневих покриттів, що застосовуються у промислово розвинутих країнах, є капілярні бар'єри. Їхня дія заснована на ефекті утримання води над межею слабопроникного та проникного шарів, розділених геотекстилем – проникним синтетичним матеріалом товщиною до 1 см. За звичайною схемою шар дрібного піску підстиляється шаром гравію і вкривається ґрунтово-рослинним шаром, що зменшує інфільтрацію за рахунок випаровування та транспірації рослинами. При похилому розташуванні шарів атмосферна волога накопичується у нижній частині піщаного шару і далі відводиться системами дренажу (рис. 4.3). Це дає можливість зменшити інфільтрацію до шару відходів на 80 – 95%.

Основними проблемами тривалої експлуатації капілярних бар'єрів є інтенсивні опади протягом холодного періоду року та осідання ґрунту, що суттєво посилюють фільтрацію до грубозернистого шару. Ефективність системи залежить від товщини та фільтраційних властивостей піску та гравію у ненасиченому стані, довжини шарів та кута їх нахилу. У холодний період внаслідок низького випаровування інфільтрація до шару відходів – найбільша. Обґрунтування раціональних параметрів капілярних бар'єрів потребує розрахунку ненасиченого вологопереносу в шаруватій товщі ґрунтів за умов нерівномірного інфільтраційного живлення.

Активні заходи і методи відновлення якості підземних вод включають гідродинамічну локалізацію, фізико-хімічну нейтралізацію, очистку забруднених підземних вод та ґрунтів за допомогою хімічних реагентів та фільтрів, бактерій та термічного впливу.

Гідродинамічна локалізація зон забруднення здійснюється шляхом спрямованої зміни фільтраційного потоку, наприклад створення гідрозавіс. На шляху міграції змінюється гідравлічний градієнт, аж до зміни напрямку фільтрації на зворотній (рис. 4.4). Тим самим гальмується поширення зони токсичних розчинів у підземних водах. Параметри свердловин, які впливають на підземний потік і динаміку зони забруднення в умовах зміненого поля швидкостей, слід оцінювати шляхом моделювання фільтрації та масопереносу.

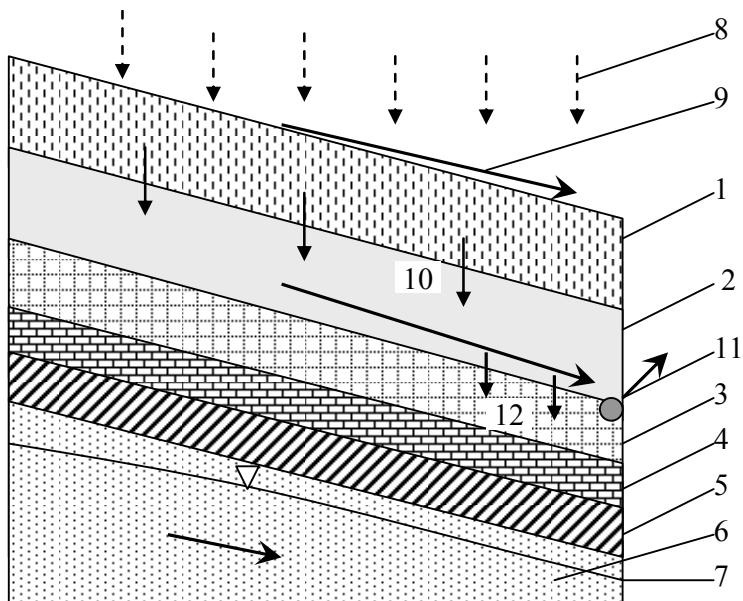
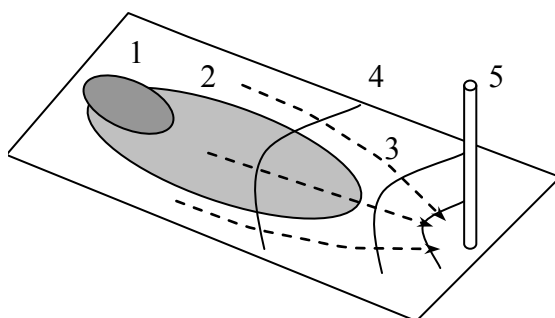


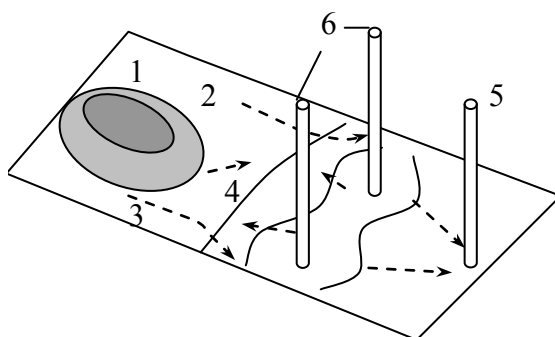
Рис. 4.3. Схема фільтрації через капілярні бар'єри:

- 1 – водозатримувальний ґрунтово-рослинний шар,
- 2 – дрібнозернистий ґрунт (пісок), 3 – гравій, 4 – шар відходів,
- 5 – ґрунт під шаром відходів, 6 – водоносний горизонт,
- 7 – рівень підземних вод, 8 – атмосферні опади, 9 – поверхневий стік, 10 – ненасичена фільтрація, 11 – дренаж води з шару дрібнозернистого ґрунту, 12 – прориви води до шару гравію

Фізико-хімічна нейтралізація, наприклад ділянок кислотного забруднення після підземного вилуговування руд металів, може здійснюватися шляхом закачування вапняних розчинів з подальшим змінням рН підземних вод (рис.4.5). На шляху поширення залишкових розчинів формуються ділянки з іншими фізико-хімічними властивостями. Розташування місць закачування вапняних розчинів, їх концентрація визначаються за допомогою моделей міграції в неоднорідному водоносному горизонті з урахуванням різної сорбційної ємності та швидкостей осадження продуктів вилуговування.



а)



б)

Рис. 4.4. Схеми природного потоку до водозабору (а) та потоку, зміненого захисними свердловинами при гідродинамічній локалізації зони забруднення (б): 1, 2 – контури зони забруднення у різні моменти часу, 3 – гідроізоп'єзи (гідроізогіпси), 4 – лінії течії, 5 – водозабір, 6 – захисні свердловини

Часто використовуваний на практиці за останні роки метод очистки підземних вод, що називається «відкачка та очистка», полягає у відкачуванні забрудненої води на поверхню через свердловини, її наступному очищенні різними способами (хімічний, біологічний) та подальшому поверненні у чисті ділянки водоносного горизонту [25]. При використанні цього методу необхідно:

1) оконтурити ділянки з підвищеними концентраціями забруднювальних речовин;

2) визначити параметри розчинності речовин та їх масообміну з породами, на основі чого вибрати оптимальний очищувач;

3) максимально близько розташувати свердловини до ділянки забруднення підземних вод;

4) попередити надлишкове забруднення технічних засобів та обладнання;

5) оптимально розташувати свердловини для нагнітання та відкачки, попереджуючи змішування забруднених та очищених вод у водоносному горизонті.



Рис. 4.5. Етапи фізико-хімічної нейтралізації кислотного забруднення у підземних водах

Поширеною схемою розташування свердловин є лінія, дуга або коло, що охоплює ділянку забруднення підземних вод. Ступінь очистки визначається показником частки речовини, вилученої з водоносного горизонту, а темпи залежать від дебітів свердловин та

властивостей порід у зоні забруднення. Для обробки води на поверхні використовується активоване вугілля, ефективність якого підтверджена досвідом багатьох країн. Воно добре вбирає органічні забруднювачі й нафтопродукти.

Для очистки підземних вод від летких органічних сполук краще застосовувати технологію рециркуляції через одну свердловину. На відміну від вилучення забрудненої води на поверхню у разі рециркуляції очищена вода повертається до водоносного горизонту через ту саму свердловину, що мінімізує порушення рівня підземних вод.

За схемою, зображеною на рис. 4.6, забруднена вода відкачується з нижньої частини водоносного горизонту або безпосередньо із зони забруднення. З води у свердловині в результаті аерації виділяються леткі компоненти, які адсорбуються фільтром уже на поверхні. Очищена вода витісняється з верхньої частини свердловини і знову надходить до водоносного горизонту. Це створює зону рециркуляції (кругообігу) води.

Забруднене повітря, що містить органічні сполуки, очищується шляхом фільтрації через активоване вугілля. До технологічних параметрів належать: концентрації забруднювальних речовин у воді та повітрі, розмір зони забруднення, дебіт свердловин. За такою технологією було очищено близько 300 ділянок у Європі та США [25].

Перспективною технологією очистки підземних вод та ґрунтів є окиснення безпосередньо у водоносному горизонті. Суміш, що містить окиснювач, закачується до зони забруднення. Як окиснювачі можна використовувати озон, перманганат калію, перекис водню, пероксид кальцію, персульфат натрію. Внаслідок їхніх хімічних реакцій з водою утворюються активні сполуки, які зв'язують та нейтралізують токсичні речовини (табл. 4.1), причому активність окиснювачів відносно різних сполук неоднакова (табл. 4.2). Найбільш швидко окиснюються перекис водню (до однієї доби), озон та пероксид кальцію (до 10 діб), найдовше – перманганат калію (до 50 діб). На це слід зважати при виборі окиснювача для зон забруднення різного розміру.

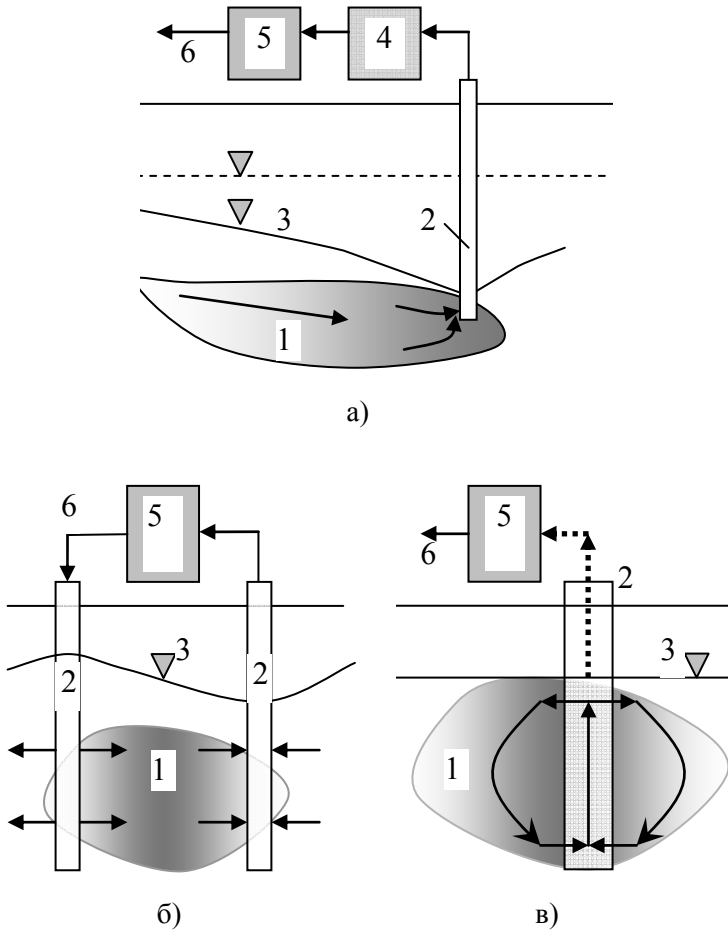


Рис. 4.6. Схеми очистки водоносного горизонту від забруднювачів шляхом відкачки води та її обробки на поверхні (а), рециркуляції через дві свердловини (б), рециркуляції через одну свердловину (в):
 1 – зона забруднення, 2 – відкачувальні та нагнітальні свердловини, 3 – рівень ґрунтових вод, 4 – накопичувач забрудненої води, 5 – система обробки води, 6 – скидання очищеної води до поверхневих і підземних вод

Таблиця 4.1

Перетворення окиснювачів при очищенні підземних вод

Окиснювач	Реакції окиснення	Реакції розкладу
Озон	$O_3 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow O_2 + H_2O$ $2OH^- + 2H^+ + 2e^- \rightarrow 2H_2O$	$2O_3 \rightarrow 3O_2$ $4HO^- \rightarrow 2H_2O + O_2$
Перманганат калію	$MnO_4^- + 4H^+ + 3e^- \rightarrow$ $\rightarrow MnO_2 + 2H_2O$	$4KMnO_4 + 4H^+ \rightarrow$ $\rightarrow 3O_2 + 2H_2O + 4MnO_2 + 4K^+$
Перекис водню	$2OH^- + 2H^+ + 2e^- \rightarrow 2H_2O$ $H_2O_2 + 2H^+ + 2e^- \rightarrow 2H_2O$ $HO_2^- + H_2O + 2e^- \rightarrow 3OH^-$	$2H_2O_2 \rightarrow 2H_2O + O_2$ $4HO^- \rightarrow 2H_2O + O_2$
Пероксид кальцію	$CaO_2 + 2H_2O + 2e^- \rightarrow$ $\rightarrow Ca(OH)_2 + 2OH^-$ $HO_2^- + H_2O + 2e^- \rightarrow 3OH^-$	$2CaO_2 + 2H_2O \rightarrow 2Ca(OH)_2$ $+ O_2$
Персульфат натрію	$S_2O_8^{2-} + 2e^- \rightarrow 2SO_4^{2-}$ $HSO_5^- + 2H^+ + 2e^- \rightarrow HSO_4^- + H_2O$	$2Na_2S_2O_8 + 2H_2O \rightarrow$ $\rightarrow O_2 + 2H_2SO_4 + 2Na_2SO_4$

Ефект очистки досягається за рахунок інтенсифікації процесів окиснення та розкладу токсичних речовин, які знаходяться у водонасиченому ґрунті в анаеробних умовах. У цьому разі зникає необхідність підйому води на поверхню та відпадають пов'язані з цим витрати. Найважливішими чинниками є хімічне споживання кисню в підземних водах, розклад окиснювачів до реакції із забруднювачем, швидкість реакції. Одним з найбільш активних окиснювачів є нагрітий персульфат натрію.

Цей спосіб у середньому дешевше порівняно з іншими і швидко дає ефект – зменшення концентрацій токсичних речовин на 80 – 90% можна досягти за 60 – 100 днів.

Спосіб біологічної очистки підземних вод та ґрунтів передбачає внесення до зони забруднення спеціальних бактерій, які ростуть і живляться речовиною, яка вилучається або нейтралізується, наприклад нафтопродуктами. Перевага такого способу полягає в тому, що ріст кількості бактерій контролюється наявністю забруднювачів, після зникнення яких колонія бактерій зменшується.

Реакційна здатність окиснювачів відносно різних речовин

Окиснювач	ПАВ	Феноли	Вибухові речовини	ПХБ	Пестициди
Перекис водню	П	В	П	Н	Н
Перманганат калію/натрію	В	В	В	П	Н
Персульфат натрію	П	В	П	Н	П
Персульфат натрію нагрітий	В	В	В	В	В
Озон	В	В	В	В	В

Примітка: ПАВ – поліциклічні ароматичні вуглеводні, ПХБ – поліхлорбіфенілі; реакційна здатність окиснювачів: В – висока, П – помірна, Н – низька.

Термічна очистка є більш перспективною для очищення верхнього шару ґрунту (в зоні аерації) від летких органічних сполук. За допомогою нагрівальних елементів збільшується температура забрудненого ґрунту й органічні речовини переходять у газоподібний стан. Одночасно повітря, що містить леткі речовини, видаляється з ґрунту вакуумними насосами і подається на очисний фільтр. Недоліком такого способу є суттєва витрата електроенергії на нагрівання ґрунту, перевагою – відсутність витрат на облаштування та експлуатацію свердловин, що нагнітають розчини.

Питання для самоконтролю

1. Які переваги і недоліки притаманні пасивному захисту підземних вод?
2. Поясніть різницю між кривими «1» і «2» на рис. 4.1, б.
3. Які штучні бар'єри використовуються на практиці?
4. Розкрийте принцип захисної дії капілярних бар'єрів.
5. Які чинники викликають пошкодження штучних бар'єрів на шляху міграції розчинів зі сховищ відходів?

6. Порівняйте два підходи до очистки підземних вод: гідродинамічна локалізація, фізико-хімічна нейтралізація. Який з них дає триваліший ефект?

7. Порівняйте два підходи до очистки підземних вод: 1 – відкачування забруднених вод та їх очистка на поверхні, 2 – нагнітання розчинів до водоносного горизонту та безпосередня очистка зони забруднення.

8. Які задачі необхідно вирішувати при проектуванні активних заходів очистки підземних вод?

9. Порівняйте хімічну, біологічну та термічну очистку підземних вод за принципом дії та можливістю (умовами) застосування.

4.2. Обґрунтування та оптимізація параметрів захисних заходів

Обґрунтування параметрів пасивного захисту: ЗСО водозаборів та зон моніторингу навколо екологічно небезпечних об'єктів. Оптимізація параметрів активного захисту: критерії управління, обмеження завдань, змінні управління. Сутність алгоритму оптимізації.

У цілому завдання обґрунтування параметрів захисних заходів можна сформулювати як досягнення бажаного екологічного ефекту за наявних природних умов і технічних можливостей. Оптимізація параметрів природоохоронних заходів передбачає вибір найбільш ефективного варіанта захисту з кількох можливих. Математична формалізація загальних цілей визначається потребами захисту підземних вод на конкретній ділянці, часто залежно від суб'єктивних чинників. На відміну від суто математичного підходу інженерне обґрунтування параметрів захисних заходів передбачає, що остаточно завдання буде сформульовано лише в процесі його розв'язування, проте залежно від поточних результатів і додаткових вимог формулювання може бути змінено.

Обґрунтування параметрів пасивного захисту. Основні завдання – це:

а) визначення розмірів зони санітарної охорони (ЗСО) навколо водозаборів та інших об'єктів, вразливих відносно забруднення,

б) визначення умов та періодів безпечної локалізації токсичних відходів у геологічному середовищі.

При визначенні контурів ЗСО слід зважати на те, що підземні води припливають до водозаборів лише з області живлення, яка обмежена нейтральною лінією течії (підрозділ 2.1). Завданням гідродинамічних розрахунків ЗСО є визначення розмірів, конфігурації області живлення, її змін у часі залежно від гідрогеологічних умов та дебітів свердловин.

Ці розрахунки стосуються переважно II поясу ЗСО (поясу обмежень), міграція в якому залежить переважно від гідрогеологічних умов навколо об'єкта захисту. Отже, контури II поясу ЗСО визначаються, виходячи з такої умови: якщо токсичні речовини надійдуть до водоносного горизонту, то внаслідок розпаду вони або взагалі не досягнуть водозабору (біологічні сполуки та короткоіснуючі радіоактивні елементи), або досягнуть його не раніше завершення проектного періоду експлуатації (більш стійкі хімічні забруднювачі). В окремих випадках неможливо повністю виключити ймовірність потрапляння до водозабору токсичних речовин, але при цьому санітарні норми на їх сумарний вміст не повинні бути перевищеними.

Попередні оцінки контурів II поясу ЗСО можуть бути одержані за допомогою аналітичних формул та співвідношень «поршневої схеми» міграції уздовж ліній течії фільтраційного потоку (підрозділ 2.1); більш точно ці контури визначаються чисельним моделюванням фільтрації та масопереносу (підрозділи 2.3, 5.2, 5.3). Область живлення водозабору в процесі експлуатації може збільшитися. Але часто контури ЗСО з деяким завищенням можуть бути встановлені за граничним положенням нейтральної лінії течії в умовах усталеного руху підземних вод або протягом проектного періоду експлуатації.

Отже, при проектуванні II поясу ЗСО водозаборів мають бути встановлені такі параметри:

- 1) положення та межі області живлення водозабору;
- 2) час руху забруднювачів від джерел їх надходження у водоносний горизонт до водозабору;
- 3) якість підземних вод у водозаборі після змішування води.

Контури ЗСО для напірного водоносного горизонту, пов'язаного з верхніми горизонтами, які вже частково забруднені або для яких

існує ризик забруднення, мають встановлюватися з урахуванням гідравлічного зв'язку та шляхів міграції між сусідніми пластами. Це також стосується водозаборів поблизу виходу напірних вод на поверхню.

Найбільш ретельно контури ЗСО мають встановлюватися для ґрунтових безнапірних вод у піщаних алювіальних та тріщинно-порових відкладах, де швидкість міграції відносно висока. У разі неоднозначного визначення нейтральної лінії течії протягом всього проектного періоду експлуатації слід визначити найбільші розміри зони, які вона може досягти в один з періодів. При цьому варто зважати на фактичне перебільшення проектного періоду експлуатації над реальним, що часто відбувається на практиці.

Навколо об'єктів значного екологічного ризику (наприклад сховища радіоактивних відходів) мають встановлюватися зони моніторингу, контури яких слід визначати на основі розрахунків міграції через штучні (металеві капсули, контейнери, глинисті шари тощо) та природні бар'єри (породний масив).

Проблемою безпечної локалізації таких об'єктів є необхідність дотримання їх довгострокової ізоляції в умовах, коли неможливо передбачити і попередити ризики геомеханічних та фізико-хімічних змін у породному масиві, наприклад, в результаті сейсмічної активності. Такі прогнози виконуються, як правило, на періоди понад 50, іноді – до 1000 років.

Тому прогноз контурів зон моніторингу небезпечних об'єктів повинен мати імовірнісний характер, тобто враховувати частоту сейсмічних та інших небезпечних проявів і уточнюватися через певні проміжки часу. Крім того, бажано передбачити можливі інженерні заходи у разі розгерметизації об'єкта та потрапляння токсичних речовин у зону активного водообміну. Ці прогнози мають спиратися не лише на фільтраційні та міграційні розрахунки, а також на результати моделювання вилуговування та розчинення речовин з твердої фази відходів, корозії та пошкодження інженерних бар'єрів, а для високоактивних ядерних відходів – також на розрахунки теплопереносу, що супроводжує їхнє зберігання.

Оптимізація параметрів активного захисту передбачає багатоваріантні розрахунки цільової функції в умовах обмежень, за яких відшукується найкращий варіант. Можна виділити два основні підходи до оптимізації:

1) економічний, спрямований на зменшення витрат унаслідок забруднення чи при проведенні активної очистки водоносного горизонту;

2) екологічний, спрямований на досягнення максимального ефекту захисних заходів.

У рамках цих підходів можливі такі постановки оптимізаційних завдань:

1) пошук найбільш ефективного способу попередження чи локалізації зони забруднення підземних вод;

2) визначення раціональних параметрів збереження та відновлення якості підземних вод;

3) мінімізація впливу господарської діяльності (видобуток корисних копалин, водовідбір) на зміни гідрогеологічного та гідрохімічного режимів.

Інженер, що проектує захисні заходи, має формалізувати ці загальні завдання у математичні співвідношення. Для цього використовуються такі списки, що формуються залежно від умов завдання й конкретного об'єкта:

- критерії управління,
- обмеження завдань,
- змінні управління.

Межа між цими списками часто умовна, залежно від постановки ті самі величини можуть виступати, наприклад, критеріями управління чи обмеженнями завдань.

Критерієм управління (цільовою функцією) є одна чи декілька формул, що відображають головну мету природоохоронних заходів у конкретному випадку. Як критерій можуть бути використані такі величини: концентрація забруднювачів у водоносному горизонті (у т.ч. в пунктах спостережень), їхній масопотік, площа зони забруднення, маса забруднювачів у водоносному горизонті, можливий водовідбір з частково забрудненого водоносного горизонту тощо. Критерії управління мають бути відносно простими, зрозумілими та зручними для розрахунків.

Приклади формалізації критеріїв управління

1. Зниження концентрації забруднювача у підземних водах у разі проведення профілактичних або активних заходів

$$\sum_i C_i \rightarrow \min, \quad (4.1)$$

де C_i – концентрація забруднювача в i -му пункті спостережної мережі.

2. Зниження масопотоку забруднювачів з водоносного горизонту до поверхневих вод після проведення захисних заходів

$$\sum_i (v_i C_i)_Г \rightarrow \min, \quad (4.2)$$

де v_i , C_i – швидкість фільтрації та концентрація забруднювача, визначені в i -му пункті спостережної мережі на межі області міграції.

3. Збільшення відбору підземних вод прийнятної якості у разі часткового забруднення водоносного горизонту

$$\sum_i Q_i \rightarrow \max, \quad (4.3)$$

де Q_i – дебіти водозаборів.

4. Зменшення площі зони забруднення підземних вод S_p , в межах якої концентрація забруднювачів перевищує санітарні норми

$$S_p \rightarrow \min. \quad (4.4)$$

5. Збільшення маси нейтралізованого забруднювача $M_{p,n}$ у водоносному горизонті

$$M_{p,n} \rightarrow \max. \quad (4.5)$$

Залежно від місцевих умов можуть бути сформульовані й інші критерії. У загальному випадку можна сформулювати багатокритеріальне завдання та відшукувати параметри, які б задовольняли одразу два або більшу кількість критеріїв. Але це надмірно ускладнює задачу, тому більш доцільно вирішувати серію однокритеріальних задач, після чого комбінувати їхні розв'язки. Так, можна визначити два методи, один з яких найкраще зменшує концентрацію забруднювачів у водоносному горизонті, другий – скорочує площу зони забруднення. На практиці може бути рекомендована комбінація цих методів. Критерії управління звичайно залежать від часу, тому слід визначити цільову функцію для декількох проміжків часу.

Обмеження завдань можуть бути двох видів:

1) техніко-економічні, що визначаються доступними засобами впливу на попередження забруднення чи на вже забруднену ділянку;

2) гідрогеологічні, що обумовлені особливостями будови водоносного горизонту та властивостями його порід.

Якщо обмеження першого виду є детермінованими, то другого – залежать від схематизації гідрогеологічних умов і прийнятих відповідно ним значень параметрів моделей.

До основних техніко-економічних обмежень у задачах оптимізації можна віднести такі:

1) місця можливого розташування свердловин для гідродинамічної локалізації чи фізико-хімічної нейтралізації;

2) часовий діапазон впливу $t < T_c$;

3) склад та структуру захисних екранів і покриттів для сховищ відходів;

4) хімічний склад наявних розчинів для нейтралізації забруднювачів у водоносному горизонті;

5) технічні параметри обладнання для створення захисних покриттів та свердловин (режими їх роботи, експлуатаційні витрати тощо);

6) фінансово-економічні обмеження;

7) санітарні норми вмісту токсичних речовин у питній воді.

До основних гідрогеологічних обмежень у задачах оптимізації можна віднести такі:

1) існуючий розподіл швидкості фільтрації на ділянці забруднення;

2) тип підземних вод, їхній хімічний склад;

3) сорбційні та інші властивості гірських порід в осередку забруднення;

4) допустимі концентрації забруднювачів у контрольних точках пласта.

Змінними управління є основні характеристики інженерних споруд та захисних заходів, які проектуються чи впроваджуються. До них відносять:

1) товщину та структуру захисних покриттів;

2) кількість свердловин для гідродинамічної локалізації чи фізико-хімічної нейтралізації;

3) координати розміщення свердловин у водоносних горизонтах;

4) змінні у часі дебїти нагнітання або відкачки води свердловинами;

5) хімічний, бактеріологічний склад та температура розчинів для очистки, що нагнітаються до зони забруднення водоносного горизонту.

Сутність алгоритму оптимізації. Для розв'язання задачі оптимізації заходів захисту підземних вод використовуються переважно фільтраційні та міграційні моделі, які доповнюються у разі необхідності моделями напружено-деформованого стану породного масиву, теплопереносу та вилуговування твердих речовин у підземних водах. Розраховані параметри та характеристики цих моделей використовуються для складення цільової функції вигляду (4.1) – (4.5), для якої треба знайти одно чи декілька «оптимальних» значень.

Існує багато методів оптимізації, за якими можна відшукати «найкращі» значення цільової функції [15, 18]. З точки зору математики задача стає громіздкою і важковирішуваною навіть у разі невеликої кількості змінних управління та параметрів (до 10). Пошук оптимуму потребує великого обсягу обчислень та машинного часу навіть на сучасних персональних ЕОМ. Тому з точки зору інженерної практики бажано на першому етапі суттєво звужити область пошуку оптимального варіанта техніко-економічними обмеженнями. На другому етапі слід задати скінченну множину можливих варіантів, виходячи з реальних можливостей впровадження захисного заходу. Наприклад, доцільно змінювати при розрахунках товщину ґрунтових шарів з кроком 1 см, а не 1 мм, координати свердловин – з кроком 5 чи 10 м, а не 1 чи 0,5 м і т. ін.

Приклад. Розглянемо задачу оптимального перехоплення забруднювача свердловиною, яка з техніко-економічних міркувань може бути розміщена в одному з трьох положень: «1», «2» чи «3». Метою заходу є збереження якості води у водозаборі нижче за потоком підземних вод (рис. 4.7).

Криві на рис. 4.8 відображають динаміку відбору забруднювача свердловиною, розташованою у різних позиціях. Криві відтворюють основні зміни масової витрати забруднювача $q = C_s Q$ через свердловину з часом; тут C_s – концентрація у свердловині, Q – її дебїт. Сумарна маса забруднювача дорівнює площі фігур, обмежених зверху кривими «1», «2» і «3».

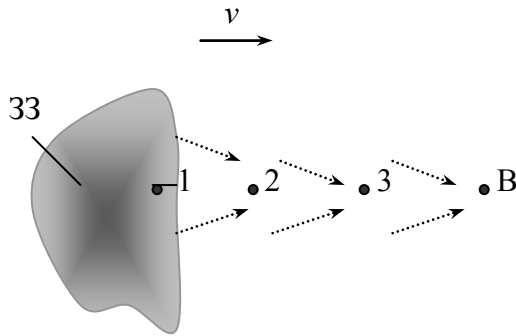


Рис. 4.7. Схема положення зони забруднення «33» у водоносному горизонті, водозабору «В» та можливих місць розташування свердловини, що відкачує воду, «1», «2» і «3»

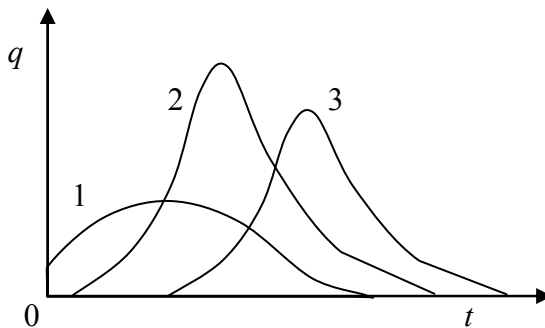


Рис. 4.8. Криві зміни у часі масопотоку q забруднювача, що відкачується свердловиною в позиціях «1», «2» і «3»

Якщо цільовою функцією буде обрана маса відібраного забруднювача, то другий з трьох можливих варіантів є оптимальним. У разі реалізації першого варіанта речовина буде одразу ж відбиратися свердловиною, але значна її частина буде рухатись униз по потоку і потрапить до водозабору. Варіанти «2» і «3» мають порівняний ефект, але позиція «2» для захисної свердловини є кращою. По-перше, бажаний ефект відбору речовини проявиться раніше, а відібрана маса буде більшою. У випадку «3» частина маси

речовини не буде відібрана через збільшення бокової міграції, що зумовлено більшим періодом дії поперечної дисперсії.

Якщо ж цільовою функцією обрати мінімум концентрації забруднювача у водозаборі, то третій варіант може виявитися найкращим. Він максимально використовує потенціал природного бар'єра (сорбційну ємність порід водоносного горизонту), при цьому менша маса відібраного забруднювача потребуватиме менших витрат на її подальшу обробку та утилізацію.

Питання для самоконтролю

1. Які параметри необхідні для обґрунтування заходів захисту підземних вод? Які моделі використовуються для цього?

2. Як встановлюються контури ЗСО навколо водозаборів? Які параметри визначаються для цього?

3. У чому полягає особливість розрахунків міграції навколо екологічно небезпечних об'єктів?

4. Наведіть приклади оптимізації задач у галузі захисту та відновлення якості підземних вод.

5. Які критерії управління використовуються при оптимізації захисту підземних вод? Наведіть приклади.

6. Які види обмежень задаються при обґрунтуванні захисних заходів? У чому їх природа?

7. Які змінні (параметри) управління використовуються при оптимізації а) гідродинамічної локалізації, б) фізико-хімічної нейтралізації, в) перехоплення забруднювачів свердловинами, г) відкачки та очистки підземних вод на поверхні, д) очистки підземних вод безпосередньо у водоносному горизонті?

8. Розкрийте сутність алгоритму оптимізації параметрів захисних заходів на одному з прикладів попереднього запитання.

Розділ 5 ЛАБОРАТОРНІ РОБОТИ

5.1. Вказівки до розрахунку міграції в програмі ModFlow

Програма **Visual ModFlow**, розроблена фірмою Waterloo Hydrogeologic Software (Канада), призначена для моделювання течій підземних вод та міграції в них розчинних речовин. Зараз вона використовується у десятках країн світу і фактично є однією з провідних програм для гідрогеологічного моделювання. У рамках даного посібника описуються лише дії, необхідні для виконання лабораторних робіт №1 та 2 (підрозділи 5.2 і 5.3), зокрема введення та редагування міграційних параметрів, проведення розрахунків міграції, перегляд їх результатів. Операції, необхідні для моделювання фільтрації, описані в [21], там же наведений стислий переклад термінів, вживаних у програмі **ModFlow**.

Уведення та редагування даних здійснюється у пункті меню «*Input*». У нових пунктах меню, що з'являться ліворуч, можна редагувати «*Edit*» або присвоювати нові значення «*Assign*» різним параметрам.

Параметри сорбції та розпаду речовин задаються у пункті «*Species parameters*» меню «*Properties*»: параметр сорбції K_d і параметри розпаду в розчині (рідкій фазі) K_{mobile} та у породі (у твердій фазі) K_{sorbed} . Якщо немає відомостей відносно різниці між параметрами K_{mobile} та K_{sorbed} , вони приймаються однаковими. Фактично вони відповідають параметру λ у рівнянні (1.14). Можна редагувати в цілому список усіх зон з різними значеннями параметрів K_d , K_{mobile} та K_{sorbed} у пункті «*Database*». Кожна зона з різними параметрами помічається окремим кольором.

Концентрація речовини, що надходить до водоносного горизонту, задається у пункті «*Recharge Concentration*» меню «*Boundaries*». Визначення нових зон та їх видалення, уведення значень концентрації та їх редагування здійснюється у пунктах «*Edit*», «*Assign*» та «*Erase*».

Уведення початкових точок для розрахунку траєкторій руху в потоці підземних вод виконується в меню «*Particles*». Додавання окремих частинок, відрізків або ліній, де розташовані ці точки, виконується у пункті «*Add*».

Визначення зон для підрахунку балансу маси речовини проводиться у меню «*Zbud*». У вікні, що відкривається після вибору пункту «*Assign*», задаються блоки, які формують певну зону. Нова зона, що позначається новим кольором, створюється після натиснення кнопки «*New*», вибору блоків та натиснення кнопки «*OK*».

Проведення розрахунків виконується після входу до меню «*Run*». Моменти, для яких будуть зберігатися проміжні результати розрахунку, задаються у пункті «*Output / Time steps*» меню «*MT3D96*». У вікні, що відкривається після вибору пункту «*Run*», слід задати виконання модулів «*MODFLOW*», «*Modpath*», «*Zonebudget*» та «*MT3D/RT3D*». У процесі розрахунку відкриється кілька вікон. В одному з них буде показаний загальний водний баланс в області фільтрації, а у вікні «*Win32 MODFLOW Suite*» відображені виконані модулі. Вихід з меню здійснюється натисненням кнопки «*Exit*» у цьому меню.

Перегляд результатів розрахунків виконується після входу до меню «*Output*». На екрані зображується розподіл напору чи рівня води («*Equipotentials*») в області фільтрації. Розподіл концентрацій можна вивести на екран, обравши пункт «*MT3D/RT3D*» (рис. 5.1). Змінюючи час у пункті меню «*Time*» ліворуч від графіка або натискаючи кнопки «*Next*» чи «*Previous*», можна переглядати розподіл концентрації у наступні чи попередні моменти часу.

Баланс маси переглядається у пункті «*Mass Budget Graphs*» меню «*Budget*». Серед вікон, що з'явилися, слід вибрати «*Time Series*», де у вигляді графіка показується значення маси речовини у виділених зонах області міграції. Криві, позначені як «*SOLUTE*», відповідають масі розчиненої речовини, позначені як «*SORBED*» – сорбованої речовини. Натиснення курсору миші на стовпчику показує числове значення відповідної складової водного балансу. Повторне натиснення на напису видаляє його з екрана. Натисненням другої піктограми над графіком з правого боку можна записати числові результати у зовнішній файл для подальшої обробки його в іншій програмі, наприклад у Microsoft Excel.

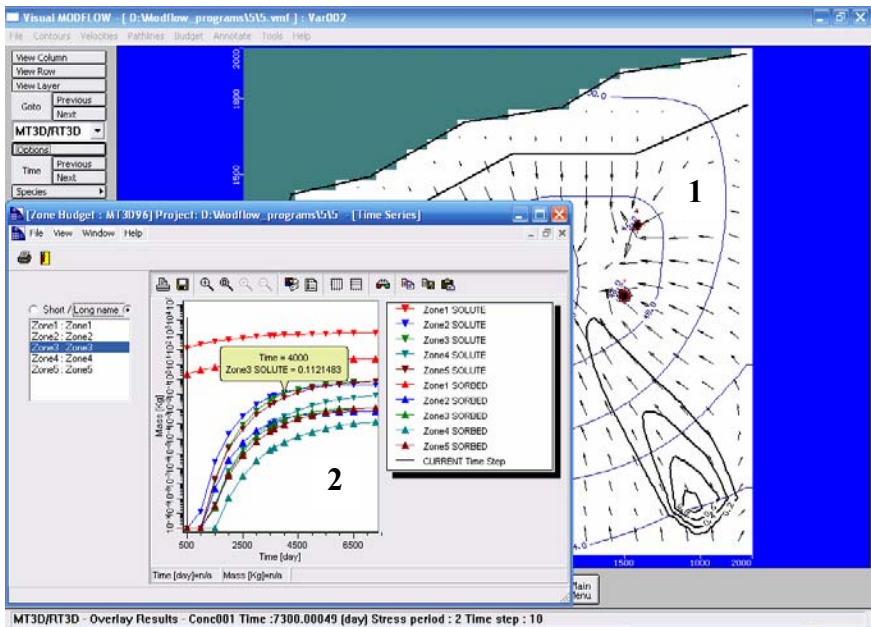


Рис. 5.1. Карта рівня підземних вод і концентрації речовини (1) та графік зміни маси речовини в різних зонах області міграції (2) після моделювання у програмі **ModFlow**

Визначити площу, яку займає зона з підвищеними концентраціями речовини, можна у програмі *Surfer*, для якої необхідно ввести числові дані розподілу концентрації. Експорт даних до зовнішнього файлу виконується у пункті «Export layer» → «Active only», де слід вибрати тип «Tecplot ASCII dat» для файлу, що записується.

5.2. Чисельне моделювання міграції речовини у підземних водах до водозабору

Опис процесу. Водонесний горизонт має контакт з рікою, контур якої показано ламаною на рис. 5.2. Внаслідок відкачування навколо свердловин утворюється зона депресії, до якої спрямований приплив підземних і річкових вод. Вище за потоком підземних вод

розташовані дві ділянки, на яких відбувається витікання розчинів, які містять токсичну речовину з усталеною концентрацією C_0 . В результаті у водоносному горизонті утворюються зони забруднення, що поширюються в напрямку водозабору. Через певний період токсична речовина починає надходити до найближчих свердловин.

Метою роботи є оцінка ролі факторів, що визначають динаміку міграції у підземних водах і впливають на зміну концентрації речовини у воді, яка відбирається свердловинами.

Математична модель. Міграція розчиненої речовини в підземних водах описується рівнянням, подібним до рівняння (1.16)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} - v_x C \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} - v_y C \right) + \sum_{i=1}^N q_i(x, y) - \lambda n_e C = n_e \frac{\partial C}{\partial t}, \quad (5.1)$$

де всі позначення аналогічні прийнятим у розділі 1, q_i – інтенсивність надходження речовини у водоносний горизонт з i -го джерела.

Вважається, що концентрація речовини перед початком міграції в підземних водах і в річці протягом усього часу дорівнює нулю. Коефіцієнти D_x і D_y розраховуються за формулами (1.2). Параметри сорбції та розпаду вважаються сталими в усій області міграції. Концентрація речовини у розчинах, що надходять у водоносний горизонт C_0 , вважається усталеною.

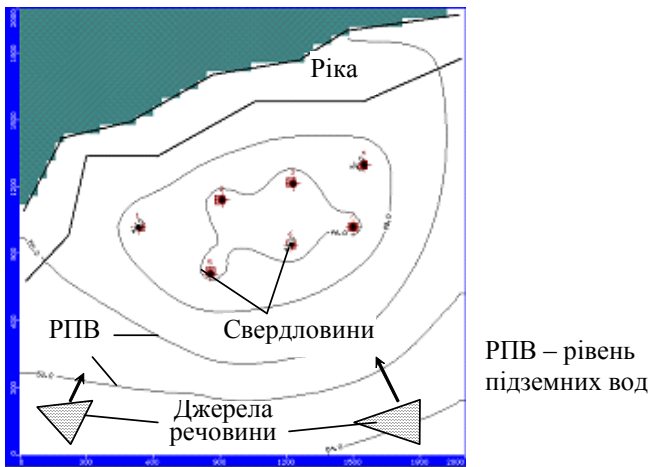


Рис. 5.2. Схема фільтрації та міграції в районі водозабору

Рівень підземних вод і концентрація речовини в них розраховується за допомогою програми **Modflow** на основі скінченнорізницевого розв'язку рівнянь фільтрації і масопереносу. Середня концентрація речовини у воді, що відкачується окремою свердловиною, визначається за формулою

$$C_s = m_b / V_w, \quad (5.2)$$

де m_b – маса речовини в розчиненому вигляді в блоці скінченнорізницевої сітки, V_w – об'єм води в ньому. Величину m_b слід визначати за графіком зміни маси речовини в блоках, позначених як окремі зони при розрахунку балансу маси в області міграції.

Порядок виконання

1. Сполучити карти рівня підземних вод і розподілу концентрації речовини у моменти часу t_1 і t_2 , показати на них напрямки течії підземних вод або траєкторії міграції.

2. Побудувати графіки зміни балансу маси у часі. На основі їх аналізу оцінити момент t_b початку надходження забруднених вод в окремі свердловини, визначити концентрацію речовини у відкачуваних водах за формулою (5.2).

3. Оцінити площу зони з перевищенням ГДК $S_{ГДК}$, де $C > C_s$, максимальну концентрацію в підземних водах $C_{gw,max}$ і у воді зі свердловин $C_{s,max}$.

Пункти 2 і 3 виконати при різних значеннях параметрів сорбції та розпаду: $n_{e,1}$, $n_{e,2}$, λ_1 , λ_2 . При зміні одного з параметрів значення решти залишати фіксованими.

Параметри.

$$\delta = 5 + j/5 \text{ м}, K_{d,1} = (0,1 + j/10) \cdot 10^{-8} \text{ л/мг}, K_{d,2} = (0,1 + j/10) \cdot 10^{-7} \text{ л/мг},$$

$$\lambda_1 = (0,2 + j/5) \cdot 10^{-5} \text{ діб}^{-1}, \lambda_2 = (0,2 + j/5) \cdot 10^{-6} \text{ діб}^{-1};$$

$$t_1 = 10 \text{ років}, t_2 = 20 \text{ років}, C_0 = (20 + j) \text{ мг/л}, C_{ГДК} = 0,1 \text{ мг/л}.$$

j – номер за списком у журналі групи.

Решта значень параметрів, в тому числі для фільтраційного розрахунку, які не потребують зміни, задана безпосередньо в програмі або взята з лабораторної роботи № 1 [21].

Оформлення результатів. Звіт про виконану роботу має включати:

1) постановку завдання з індивідуальними значеннями вихідних даних,

- 2) карти розподілу концентрації та РПВ у моменти часу t_1 і t_2 ,
- 3) результати розрахунків при різних значеннях параметрів у табличному вигляді:

№ варіанта	$C_{gw,max}$	$C_{s,max}$	$S_{ГДК}$	$t_{b,1}$	$t_{b,2}$	$t_{b,3}$	$t_{b,4}$
1							
2							
...							

5.3. Чисельне моделювання міграції речовин у підземних водах до водозабору в умовах його захисту

Гідрогеологічні та гідрогеохімічні умови прийняті аналогічно тим, що у підрозділі 5.2. Додатково для захисту водозабору від надходження забруднювальних речовин у водоносному горизонті розміщуються дві свердловини (рис. 5.3).



Рис. 5.3. Схема фільтрації та міграції в районі водозабору при його захисті

Вони можуть працювати в режимі нагнітання для створення «гідродинамічної завіси» перед рухомих фронтом розчиненої речовини в підземних водах. Також вони можуть використовуватися для відкачування забрудненої води, що фільтрується до водозабору. В результаті роботи захисних свердловин можна знизити вміст токсичних речовин у воді, що відбирається водозабором, до рівня, який не перевищує ГДК.

Метою роботи є визначення раціональних параметрів захисту водозабору: розміщення додаткових свердловин, їх дебіти і періоди роботи.

Математична модель використовується та сама, що й у попередній лабораторній роботі. Додатково враховується змінний у часі дебіт захисних свердловин.

Захисні заходи моделюються у такий спосіб:

1. Розміщуються дві нагнітальні свердловини з дебітами Q_{d1} і Q_{d2} на відстані не далі L_{min} від найближчої свердловини водозабору (рис. 5.2), причому їх сумарний дебіт ($Q_{d1} + Q_{d2}$) не повинен перевищувати 1/3 від сумарного дебіту інших свердловин. Нагнітальні свердловини повинні починати роботу через інтервали часу t_1 і t_2 з початку роботи водозабору.

2. Розміщуються дві відкачувальні свердловини з дебітами Q_{d3} і Q_{d4} на шляху міграції речовини до водозабору, причому їх сумарний дебіт ($Q_{d3} + Q_{d4}$) не повинен перевищувати 1/3 від сумарного дебіту інших свердловин. Захисні свердловини повинні починати роботу через інтервали часу t_3 і t_4 з початку роботи водозабору.

Необхідно визначити такі параметри захисних заходів, щоб концентрація в усіх свердловинах водозабору не перевищувала ГДК:

- 1) мінімально можливі дебіти Q_{d1} , Q_{d2} , Q_{d3} , Q_{d4} ,
- 2) координати захисних відкачувальних і нагнітальних свердловин,
- 3) максимально пізніші моменти часу початку роботи свердловин t_1 , t_2 , t_3 , t_4 .

Рівень підземних вод і концентрація речовини у них розраховуються за допомогою програми **Modflow**. Середня концентрація речовини у воді, що відкачується окремою свердловиною, визначається як у попередньому підрозділі.

Порядок виконання

1. Побудувати графіки зміни в часі балансу маси для випадків без захисту водозабору і з його захистом. Показати на графіках, що максимальна концентрація речовини у свердловинах в умовах захисту не перевищує ГДК.

2. Побудувати карти рівня підземних вод і вмісту речовини в підземних водах для всіх випадків у момент часу, що відповідає періоду прогнозу t_p .

3. Визначити зниження концентрації при різних способах захисту.

Пункти 1, 2 і 3 виконуються для першого, другого ряду свердловин і двох одночасно працюючих рядів свердловин.

Параметри

$$\delta = 5 + j/5 \text{ м}, K_d = (0,1+j/10) \cdot 10^{-8} \text{ л/мг}, \lambda_1 = (0,2+j/5) \cdot 10^{-6} \text{ діб}^{-1};$$

$$t_p = 20 \text{ років}, C_0 = (20 + 2 \cdot j) \text{ мг/л}, C_{\text{ПДК}} = 0,1 \text{ мг/л};$$

j – номер за списком у журналі групи. Решта значень параметрів, у тому числі для фільтраційного розрахунку, які не вимагають зміни, задана безпосередньо в програмі або взята з лабораторної роботи № 1 [21].

Оформлення результатів

Звіт про виконану роботу має включати:

1) постановку завдання з індивідуальними значеннями вихідних даних;

2) карти розподілу концентрації та РПВ у момент часу t_p ;

3) графіки зміни у часі балансу маси до моменту часу t_p ;

4) результати розрахунків при різних значеннях параметрів у табличному вигляді для обох варіантів захисту.

Працюючі свердловини	$C_{s,\max}^{(1)}$... варіант захисту						
		Q_{d1}	t_{1p}	(x_{1p}, y_{1p})	Q_{d2}	t_{2p}	(x_{2p}, y_{2p})	$C_{s,\max}^{(2)}$
1-й ряд								
2-й ряд								
1-й і 2-й ряди одночасно								

Примітка: $C_{s,\max}^{(1)}$ – максимальна концентрація речовини у воді, що відбирається свердловинами незахищеного водозабору; $C_{s,\max}^{(2)}$ – те саме в умовах захисту за варіантом «1» за допомогою нагнітальних свердловин; (x_{1p}, y_{1p}) та (x_{2p}, y_{2p}) – координати захисних свердловин; t_{1p} , t_{2p} – моменти початку роботи захисних свердловин.

5.4. Визначення параметрів міграції на основі зворотного моделювання

Відомості з теорії наведені у підрозділі 1.1.

Метою роботи є вивчення процесу міграції у піщаному ґрунті, на основі чого оцінюються параметри гідродинамічної дисперсії δ та рівноважної оборотної сорбції K_d . Ці параметри визначаються шляхом математичного моделювання одновимірної нестационарної міграції і порівняння експериментальних та розрахованих значень положення фронту міграції.

Схема експериментальної установки показана на рис. 5.4.

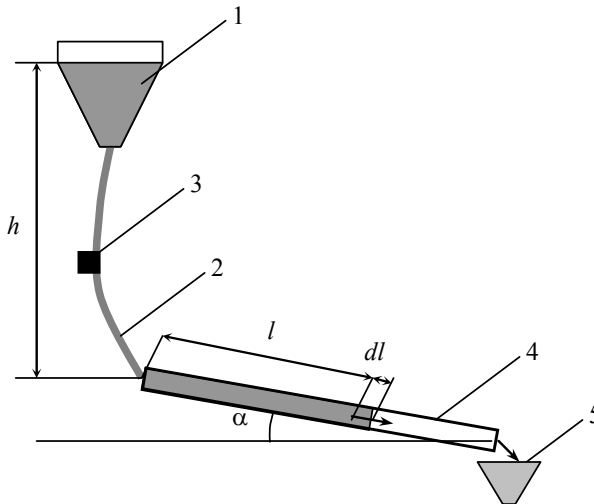


Рис. 5.4. Схема експериментальної установки

Прозора скляна трубка 4 заповнена промоченим піском. Посудина 1, у яку налита підфарбована вода, з'єднана шлангом 2 з трубкою 4. В посудині підтримується напір h , що дорівнює висоті водного стовпа над лівим кінцем трубки. Затискач 3 на з'єднувальному шлангу регулює надходження води до трубки. Перед початком досліду затискач замкнений. Уздовж скляної трубки закріплена лінійка для визначення положення фронту міграції. На протилежному до входу шланга кінці трубки закріплюється посудина 5 для збирання води, що витікає з трубки.

Математична модель міграції речовини в трубці базується на диференціальному рівнянні масопереносу нейтральної домішки, що частково поглинається піском унаслідок сорбції. На вхідній межі підтримується незмінна у часі вхідна концентрація речовини. Підфарбована рідина внаслідок конвекції та гідродисперсії просувається у насиченому піску вздовж трубки, при цьому зміна кольору піску визначає динаміку руху рідини.

Зміна концентрації C з часом уздовж трубки розраховується за формулою (2.20). Коефіцієнт гідродисперсії визначається за формулою (1.2).

За формулою (2.20) можна обчислити положення точки із заданою концентрацією. Це необхідно для визначення фронту рідини, що можна зробити також візуальним способом. Так, приймаємо, що концентрація рідини на фронті витиснення $C_{fp} = \alpha C_0$, причому вхідна концентрація C_0 задається одиничною, а коефіцієнт $\alpha = 0.03 \dots 0.1$.

Відхилення розрахованого положення фронту кольорової рідини у різні моменти часу можна визначити за формулою

$$I(l_e, l_m) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (l_{exp,i} - l_{mod,i})^2}, \quad (5.3)$$

де N – кількість вимірів; $l_{exp,i}$, $l_{mod,i}$ – положення фронту кольорової рідини відповідно до експериментальних даних та моделювання в моменти часу t_i .

Шукані значення параметра гідродисперсії δ та коефіцієнта розподілу K_d відповідають мінімальному значенню I , яке визначається шляхом серії розрахунків.

Порядок проведення дослідів

1. Зафіксувати скляну трубку з попередньо водонасиченим піском.
2. Визначити швидкість фільтрації через трубку, подаючи чисту воду.
3. Відкрити затискач та послідовно визначити положення фронту підфарбованої рідини у часі через кожні 30 – 60 с.

Обробка результатів експерименту та оформлення звіту

1. Скласти таблицю положень фронту рідини у часі, побудувати відповідний графік $l(t)$.
2. Використовуючи формулу (5.3), оцінити параметри δ та K_d з похибкою 20 %, при яких відхилення розрахованих значень фронту рідини від результатів вимірів є мінімальним. Скласти відповідну таблицю.

Приклад оформлення результатів моделювання:

	$K_{d,min}$	$K_{d,opt}$	$K_{d,max}$
δ_{min}	I_{11}	I_{12}	I_{13}
δ_{opt}	I_{21}	I_{22}	I_{23}
δ_{max}	I_{31}	I_{32}	I_{33}

Значення I_{ij} ($i = 1,3, j = 1,3$) обчислюються за формулою (5.8). Значення I_{22} має бути мінімальним серед усіх значень у таблиці, воно є «оптимальним» для кількісної оцінки параметрів гідродисперсії та сорбції в експерименті.

3. Обчислити профілі концентрації за формулою (2.20) для трьох різних моментів часу та показати відповідні графіки. Порівняти їх з положенням фронту міграції у ці моменти часу.

4. Визначити проміжки часу, де відхилення теоретичних результатів від експериментальних найбільші та найменші.

Джерела похибок:

- 1) неоднорідність піску, що заповнює трубку,
- 2) зменшення напору під час експерименту,
- 3) похибка візуального визначення фронту міграції,
- 5) наявність защемленого повітря у насиченому піску,
- 6) не зовсім щільне укладення піску в трубіці.

5.5. Статистичний аналіз гідрогеологічних і гідрохімічних даних

Зміст завдання. За допомогою засобів MS Excel провести статистичний аналіз змін у часі рівня підземних вод та вмісту в них макрокомпонентів у зоні впливу сховища відходів гірничодобувного підприємства.

Опис даних. У файлах *ПВ_лес.xls* і *ПВ_неоген.xls* містяться числові дані про зміну рівня підземних вод у спостережних свердловинах навколо хвостосховища, які встановлені у лесовому та неогеновому водоносних горизонтах. За відсутності даних у відповідну комірку внесено значення «-1». У файлах *ХС_лес_Комп.xls* і *ХС_неоген_Комп.xls* містяться дані про зміни вмісту в підземних водах таких компонентів, як «Na + K», NH₄, сульфати, сухий залишок, жорсткість протягом того ж періоду. У зазначених файлах дані систематизовані за свердловинами, а у файлах *ХС_лес_Св.xls* і *ХС_неоген_Св.xls* – за компонентами. У файлі *ХС_пульпа.xls* містяться дані про хімічний склад пульпи у двох секціях хвостосховища.

Увага! При обчисленнях слід виключати періоди, коли спостереження не проводилися.

Порядок виконання

1. Статистична обробка даних стосовно гідрогеологічного режиму.

А. Для заданих свердловин у файлах *ПВ_лес.xls* і *ПВ_неоген.xls* визначити ті, в яких середній рівень підземних вод за весь період спостережень був максимальний і мінімальний. Використовувати пункт «Описова статистика» меню «Сервіс – Аналіз даних» або функції СРЗНАЧ, МАКС, МИН.

Б. Побудувати графіки зміни РПВ у чотирьох відібраних свердловинах за допомогою майстра діаграм, на графіках побудувати лінії тренда. За критерієм Фішера (підрозділ 3.3) встановити статистичну значущість рівнянь регресії.

В. Визначити момент у період спостережень, коли в кожній з відібраних свердловин був досягнутий максимальний та мінімальний РПВ. Використовувати функції, вказані в п. 1.А. Порівняти результат із графіком.

Г. Визначити, чи впливає пора року на зміну РПВ (чи є кореляція між весняними чи літніми місяцями та рівнем підземних вод).

2. Побудова залежностей для опису гідрогеологічного режиму.

А. Скласти рівняння регресії для опису зміни РПВ протягом періоду спостережень у чотирьох свердловинах, відібраних в п. 1.А. Використовувати функцію ЛИНЕЙН або пункт «Регресія» у меню «Сервіс – Аналіз даних».

Б. Визначити за побудованими рівняннями тенденцію зміни РПВ (зменшення, збільшення).

В. За допомогою функції КОРРЕЛ або пункту «Кореляція» в меню «Сервіс – Аналіз даних» обчислити коефіцієнти кореляції між часовими рядами змін РПВ у заданих свердловинах з обох водоносних горизонтів. Статистичну значущість коефіцієнта кореляції обчислити за критерієм Стьюдента (підрозділ 3.3).

3. Статистична обробка даних стосовно гідрохімічного режиму.

А. Використовуючи дані файлів *ХС_лес_Комп.xls*, *ХС_лес_Св.xls*, *ХС_неоген_Комп.xls*, *ХС_неоген_Св.xls*, визначити із заданих свердловин ті, в яких вміст вимірюваних компонентів найбільший та найменший.

Б. Скласти рівняння регресії і визначити тенденцію зміни концентрації речовин у заданих свердловинах.

4. Побудова залежностей для опису змін гідрохімічного режиму.

А. Обчислити коефіцієнти кореляції між умістом двох обраних компонентів у всіх свердловинах, відібраних у п. 3.А. Встановити статистичну значущість коефіцієнтів кореляції між різними свердловинами за допомогою критерію Стьюдента (підрозділ 3.3).

Б. Обчислити коефіцієнти кореляції між умістом двох компонентів у секціях хвостосховища і в заданих свердловинах лесового або неогенового горизонту. Встановити ступінь взаємозв'язку між різними компонентами.

Варіанти завдань. У таблиці наведено номери свердловин з файлів для всіх варіантів. Номери варіантів визначаються за списком журналу групи.

№ у списку	Лесовий горизонт		Неогеновий горизонт	
	Рівень води	Вміст компонентів	Рівень води	Вміст компонентів
1	2	3	4	5
1, 11	1аз, 2аз, 3, 4, 5, 16	2, 22, 5675, 5761,	2а, 3а, 3р, 4а, 5а, 5р	2а, 3а, 3р, 4р
2, 12	3, 4, 5аз, 21, 22, 4008	5675, 6708, 6711, 6717	3а, 3р, 4а, 5а, 5р, 7р	3а, 3р, 4р, 5р
3, 13	4008, 4040, 21, 4047, 4051, 22	2, 22, 6708, 6711	3р, 4а, 5а, 5р, 7р, 8а	4р, 5р, 7р, 8р
4, 14	1аз, 2аз, 3, 4047, 4051, 4061	5675, 5761, 6711, 6717	4а, 5а, 5р, 7р, 8а, 8р	7р, 8р, 9р, 10р
5, 15	4, 5, 4051, 4061, 5619, 5665	2, 22, 5675, 5761,	5а, 5р, 7р, 8а, 8р, 9р	8р, 9р, 10р, 13р
6, 16	4061, 4068, 5619, 5665, 5668, 5672	5675, 6708, 6711, 6717	5р, 7р, 8а, 8р, 9р, 10а	9р, 10р, 13р, 16
7, 17	5675, 5677, 5678, 5679, 5683, 5685	2, 22, 6708, 6711	7р, 8а, 8р, 9р, 10а, 10р	10р, 13р, 16, 17р
8, 18	5687, 5691, 5692, 5693, 5670, 5761	2, 22, 5675, 5761	8р, 9р, 10а, 10р, 13р, 16	13р, 16, 17р, 18
9, 19	6708, 6710, 6711а, 6715, 6717, 6722	5675, 6708, 6711, 6717	9р, 10а, 10р, 13р, 16, 17р	16, 17р, 18, 2а
10, 20	3, 4051, 4061, 5675, 5687, 6708,	5675, 5761, 6711, 6717	10а, 10р, 13р, 16, 17р, 18 р	17р, 18, 2а, 3а

СПИСОК ЛИТЕРАТУРИ

1. Бочеввер, Ф.М. Защита подземных вод от загрязнения [Текст] / Ф.М. Бочеввер, Н.Н. Лапшин, А.Е. Орадовская. – М.: Недра, 1979. – 224 с.
 2. Бэр, Я. Физико-математические основы фильтрации воды [Текст] / Я. Бэр, Д. Заславски, С. Ирмей. – М.: Мир, 1971. – 451 с.
 3. Веригин, Н.Н. Методы прогноза солевого режима грунтов и грунтовых вод [Текст] / Н.Н. Веригин, С.В. Васильев, Н.П. Куранов и др. – М.: Колос, 1979. – 336 с.
 4. Гидрогеологические исследования за рубежом [Текст] / под ред. Н.А. Маринова. – М.: Недра, 1982. – 426 с.
 5. Гидродинамические и физико-химические свойства горных пород [Текст] / Н.Н. Веригин, С.В. Васильев, В.С. Саркисян и др. – М.: Недра, 1977. – 271 с.
 6. Гидротехнические сооружения [Текст] / Г.В. Железняков, Ю.А. Ибад-заде, П.Л. Иванов и др. – М.: Стройиздат, 1983. – 543 с.
 7. Голубев, В.С. Гетерогенные процессы геохимической миграции [Текст] / В.С. Голубев, А.А. Гарибянц. – М.: Недра, 1968. – 192 с.
 8. Дэвис, Дж.С. Статистический анализ данных в геологии [Текст]: в 2 кн.: пер. с англ. / Дж.С. Дэвис. – М.: Недра, 1990.
 9. Згуровский, М.З. Численное моделирование распространения загрязнения в окружающей среде [Текст] / М.З. Згуровский, В.В. Скопецкий, В.К. Хрущ и др. – К.: Вища шк., 1997. – 368 с.
 10. Каждан, А.Б. Математическое моделирование в геологии и разведке полезных ископаемых [Текст]: учеб. пособие / А.Б. Каждан, О.И. Гуськов, А.А. Шиманский. – М.: Недра, 1979. – 168 с.
 11. Лехов, А.В. Физико-химическая гидрогеодинамика [Текст]: учебник / А.В. Лехов. – М.: КДУ, 2010. – 499 с.
 12. Лукнер, Л. Моделирование миграции подземных вод [Текст] / Л. Лукнер, В.М. Шестаков. – М.: Недра, 1986. – 208 с.
 13. Львовский, Е.Н. Статистические методы построения эмпирических функций [Текст] / Е.Н. Львовский. – М.: Высш. шк., 1988. – 239 с.
 14. Мироненко, В.А. Проблемы гидрогеоэкологии [Текст]: в 3 т. / В.А. Мироненко, В.Г. Румынин. – М.: МГГУ.
- Т. 1: Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов. – 1998. – 611 с.

- Т. 2: Опыт-но-миграционные исследования. – 1999. – 394 с.
- Т. 3, кн. 1: Прикладные исследования – 1999. – 311 с.
- Т. 3, кн. 2: Прикладные исследования. – 1999. – 815 с.
15. Оптимизационные модели при решении задач рационального отбора подземных вод и защиты их от загрязнения [Текст] / Ю.А. Церковский, В.И. Угорец. – М., 1991. – 85 с. – (Гидрогеология и инженерная геология: Обзор ВИЭМС).
16. Орадовская, А.Е. Санитарная охрана водозаборов подземных вод [Текст] / А.Е. Орадовская, Н.Н. Лапшин. – М.: Недра, 1987. – 167 с.
17. Пелешенко, В.И. Применение вероятностно-статистических методов для анализа гидрохимических данных [Текст] / В.И. Пелешенко, Н.И. Ромась. – К.: Изд-во Киев. ун-та, 1977. – 66 с.
18. Проектирование водозаборов подземных вод [Текст] / А.И. Арцев, Ф.М. Бочеввер, Н.Н. Лапшин и др. – М.: Стройиздат, 1976. – 292 с.
19. Развитие исследований по теории фильтрации в СССР [Текст] / под ред. П.Я. Полубариновой–Кочиной. – М.: Наука, 1969. – 545 с.
20. Рудаков, Д.В. Моделирование массопереноса радионуклидов в потоках подземных вод [Текст] / Д.В. Рудаков. – Д.: Герда, 2010. – 160 с.
21. Рудаков, Д.В. Моделирование в гидрогеології [Текст]: навч. посібник / Д.В. Рудаков. – Д.: НГУ, 2011. – 88 с.
22. Рыжов, П.А. Математическая статистика в горном деле [Текст] / П.А. Рыжов. – М.: Высш. шк., 1973. – 287 с.
23. Тютюнова, Ф.И. Гидрогеохимия техногенеза [Текст] / Ф.И. Тютюнова. – М.: Наука, 1987. – 335 с.
24. Фрид, Ж. Загрязнение подземных вод [Текст] / Ж. Фрид. – М.: Недра, 1981. – 304 с.
25. Groundwater Treatment Technology [Text] / Edited by Evan K. Nyer. John Wiley & Sons, Inc. – 2009. – 424 p.

ПРЕДМЕТНИЙ ПОКАЖЧИК

- Апроксимація області міграції 69
- Вибірка статистична** 93
– однорідність 93
- Гідродинамічна дисперсія 9
Гідродинамічна локалізація 124
Гідрохімічний фон 112
Гістограма 86
- Дебіт «безсольовий»** 47
- Джерела речовини**
– лінійні 24
– об'ємні 25, 60
– площинні 24, 58
– точкові 24, 55
- Дисперсія 81
Дисперсійний аналіз 96
- Екссес** 82
Екрани захисні 124
- Закон розподілу**
– біноміальний 84
– логнормальний 84
– нормальний 83
- Зв'язок між даними**
– стохастичний 105
– функціональний 105
- Заходи захисту підземних вод**
– активні 124
– профілактичні 122
- Змішування вод 36
Зона санітарної охорони 132
- Капілярні бар'єри** 124
Коефіцієнт варіації 82
– асиметрії 82
– кореляції 108
- Конвективний перенос 8
- Кореляційне поле 107
Критерій Стьюдента 95
– Фішера 96
- Лінія течії** 9
– головна 35
– нейтральна 35, 39
- Масообмін** 10
Межові умови міграції 17
- Область живлення водозабору**
35
- Оптимізація водоохоронних заходів** 134
– критерії 135
– обмеження 136
– змінні управління 137
- Очистка підземних вод**
– відкачкою та обробкою 126
– окисненням 128
– термічна 131
- Потенціал швидкості фільтрації**
34
- Природні бар'єри на шляху міграції** 121
- Регресія лінійна** 99
– нелінійна 101
– оцінка надійності 102
- Рівняння балансу маси** 15
– масопереносу 16
- Розпад речовини** 13
- Схематизація**
– геоміграційна 19
– джерел речовини 22

- Скінченнорізницеві
 - сітка 70
 - блок 70
 - крок 71
- Середнє значення 85
 - «ковзне» 116
- Сорбція
 - ізотерма 11
 - лінійна 11
- Статистична гіпотеза 89
 - значимість 90
- Схема скінченнорізницева
 - явна 75
 - неявна 75
- Схема міграції
 - від точкового джерела 57
 - від площинного джерела 59
 - «пакетна» 62
 - до водозабору 49
 - перпендикулярно шарам 32
 - «поршневого» витиснення 34
 - уздовж шарів 30
 - у тріщинно-блоковій структурі 27
- Тренд-аналіз 116
- Фізико-хімічна нейтралізація забруднювачів 125
- Функція течії 33
 - розподілу випадкової величини 80
- Часові ряди 115
 - шари 71

Для нотаток

Навчальне видання

Рудаков Дмитро Вікторович

**МАТЕМАТИЧНІ МЕТОДИ
В ОХОРОНІ ПІДЗЕМНИХ ВОД**

Навчальний посібник

Редактор Ю.В. Рачковська

Підписано до друку 03.04.12. Формат 30×42/4
Папір офсет. Ризографія. Ум. друк. арк. 6,4.
Обл.-вид. арк. 6,4. Тираж 50 пр. Зам. №

Підготовлено до друку та видруковано
у Державному ВНЗ «Національний гірничий університет»
Свідоцтво про внесення до Державного реєстру ДК №1842 від
11.06.2004

49005, м. Дніпропетровськ, просп. К. Маркса, 19