

А. Б. Ситников

МЕТОДИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ОБОСНОВАНИЯ ДОСТОВЕРНОСТИ ОЦЕНКИ ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН И РАЗРАБАТЫВАЕМОЙ КОНЦЕПЦИИ ПЕССИМИСТИЧЕСКИХ И ОПТИМИСТИЧЕСКИХ ПРОГНОЗНЫХ РЕШЕНИЙ

Запропоновані чотирикритеріальна оцінка поняття достовірності, а також постулати (положення) фізичного та математичного характеру, можливість визначення кінетичних коефіцієнтів, локальна термодинамічна рівновага, сталість фізична і, нарешті, сталість обчислювальних операцій, яка забезпечує з необхідною точністю збіжність до "істинних" значень. Основними рекомендованими критеріями є такі: фізико-хімічна визначеність (сутність), детермінізм (100%-на ймовірність), компетентний розмір (час), точність дослідних визначень та математичного моделювання. Проаналізовані та систематизовані найголовніші аспекти обґрунтування достовірності оцінки дослідних і прогнозованих фізичних величин у гідрогеології, а також концепція песимістичних і оптимістичних розв'язувань, що розробляється.

The four-criteria estimation for the reliability concept as well the postulates of physical and mathematical nature (the positions), namely, the potential for the assessment of the kinetic coefficients, the local thermodynamic equilibrium, the physical steadiness, and, finally, the robustness of computing operations providing the convergence to the "true" value with the required accuracy are proposed. The main recommended criteria are the followings: physical and chemical determinancy (an essence), determinism (100% probability), the competent size (time), the accuracy of experimental and mathematical modelling results.

Одной из важнейших проблем современности является оценка достоверности (истинности, точности) определяемых физических величин, используемых для обоснования эффективных хозяйственных и природоохранных мероприятий. Это касается не только качественных, но и особенно их количественных характеристик, связанных с точностью проводимых измерений и вычислений, точнее, с определением погрешностей (ошибок) указанных величин. Математика (наука о числе, количестве, точности) определяет достоверность исследуемых ее абстрактных (отвлеченных от физической сущности) численных величин как понятие, связанное с вероятностью, которая стремится к единице, т. е. 100%-но обеспеченную, детерминировано однозначную. При этом мерой вероятности является отношение определяемой величины к истинной, а под детерминированным понимается закономерный, причинно взаимосвязанный, не случайный [8, 9].

Однако для реальных физических величин нельзя ограничиться только одним указанным критерием. Для количественных гидрогеологических исследований, основанных на математическом моделировании наиболее сложных, в том числе нелинейных

процессов водной миграции веществ в почвогрунтах, нами предлагаются такие четыре критерия достоверности величин (опытно определяемых или вычисляемых по известным формулам, а также прогнозируемых): физико-химическая сущность, детерминированность, компетентность элементарных размеров и времен, контролируемость точности опытных определений и математического моделирования (включая методы подготовки и реализации исходных моделей, обработки прогнозных результатов, а также приборные погрешности вычислительных машин и устройств для опытных натурных наблюдений и экспериментов).

Исходные прогнозные и эпигнозные физико-математические модели обычно представлены системой дифференциальных параболического типа или интегральных уравнений, полученных на основе всеобщих уравнений сохранения массы (объема) веществ и сохранения количества движения (импульса сил), а также доказанных законов (механизмов) состояния. В нашем случае неизвестными, определяемыми прогнозными величинами являются такие величины (функции), изменяющиеся в пространстве и во времени: уровни и напоры подземных вод, давления, массовые и объемные скорости, удельные расходы воды и солей. В то время как исходными для

прогнозирования – параметры, начальные и граничные условия, внутренние источники массоизменения. Под граничными условиями подразумеваются величины, определяющие воздействие на исследуемую среду со стороны соседних пространств и представляющие собой так называемые внешние источники массоизменения веществ. Известно, что граничные условия могут быть I рода (известные функции), II рода (производные функций, удельные расходы, скорости), III рода (совместный учет I и II родов). Примером специфического условия III рода нами рассматривается учет испарения (конденсации) влаги на дневной поверхности. Начальные условия представляются I родом (известными функциями). Параметры – это величины, обычно характеризующие в виде некоторых коэффициентов законы (механизмы) состояния, граничные условия (II–III родов), а также внутренние и внешние источники массоизменения. Они представляются в виде однозначных кусочно-постоянных значений либо некоторых нелинейных зависимостей, например обобщенных зависимостей коэффициента влагопереноса и фильтрации от всасывающего давления [5].

Именно погрешности в определении параметров законов (механизмов) состояния вносят наибольший вклад в суммарную погрешность математического моделирования по причине трудной оцениваемости достоверности методов их определения. Все остальные составляющие исходных моделей, в частности граничные условия и источники массообмена, обычно более надежны с точки зрения логического осмысления.

Обратим внимание, что абсолютно точных величин вообще не существует, тем более при математическом моделировании, когда модель всегда отображает объективную реальность с некоторой погрешностью. Правильнее говорить о требуемой точности, необходимой для осуществления чего-либо. К тому же понятие погрешности (ошибки), определяющей точность, более содержательно, так как указывает, в частности, на происхождение разного вида ошибок. Кстати, обычно принципиальными ошибками являются объективные методические, не устранимые, в отличие от субъективных, например картографических и

других приемов обработки результатов математического моделирования. Иногда оценка погрешности прогнозируемых функций может оказаться менее трудоемкой, чем прогноз самих функций, "истинность" которых легко оценивается согласно смоделированным ошибкам.

Вычислительные ошибки весьма разнообразны по происхождению. Из наиболее важных погрешностей вычислений выделим ошибки за счет:

- 1) округлений и деления на числа, близкие к нулю, свойственные даже точным методам;
- 2) принципиального неравенства дифференциала приращению функции;
- 3) аппроксимации (замены) исходных уравнений, начальных и граничных условий, а также расчетных схем, включая другие погрешности методического характера;
- 4) технических особенностей вычислительных машин, компьютеров, микрокалькуляторов;
- 5) субъективного технического сбоя вычислительных устройств, неправильного внесения исходных данных ручным способом;
- 6) задания крайне возможных параметров, граничных и начальных условий (по сути чувствительности исходных уравнений);
- 7) картографической обработки.

Указанные во всех пунктах погрешности, кроме п. 5 и 7, условно отнесем к методическим, подчеркнув, что принципиально может быть уменьшена приборная погрешность в результате усовершенствования.

Основная цель обоснования достоверности (истинности) прогнозируемой величины заключается в определении доказанных пределов изменения истинных величин. А это значит, что вместо традиционных относительных погрешностей

$$\sigma_{\text{отн}}(t, \ell) = \frac{\Phi_{\text{опр}}(t, \ell) - \Phi_{\text{ист}}(t, \ell)}{\Phi_{\text{ист}}(t, \ell)}$$

(где t – время; ℓ – пространственная координата; Φ – величина; $\sigma_{\text{отн}}$ – относительная, $\sigma_{\text{опр}}$ – определяемая; $\sigma_{\text{ист}}$ – истинная) следует использовать более наглядные абсолютные погрешности равные

$$\sigma_{\text{абс}} = \Phi_{\text{опр}}(t, \ell) - \Phi_{\text{ист}}(t, \ell) = \lambda_{\text{абс}} \Phi_{\text{ист}}(t, \ell),$$

где $\lambda_{\text{абс}}$ – абсолютная ошибка. При этом

$$\Phi_{\text{опр}} = \frac{\lambda_{\text{абс}} (\sigma_{\text{отн}} + 1)}{\sigma_{\text{отн}}} = \lambda_{\text{абс}} + \frac{\lambda_{\text{абс}}}{\sigma_{\text{отн}}}.$$

Теперь попытаемся систематизировать методические аспекты обоснования отдельных предложенных критериев (показателей) достоверности. Прежде всего выделим основополагающие постулаты [8], т. е. не самоочевидные положения или принципы, служащие основой для построения какой-нибудь научной теории. Таковыми в нашем случае являются [5, 9]:

– Во-первых, теоретически, исходя из представлений о молекулярном строении рассматриваемых сред и силах взаимодействия между элементарными частицами, можно вычислить кинетические коэффициенты и обосновать уравнения баланса средних плотностей массы, импульса и энергии.

– Во-вторых, в изучаемой геологической среде существует локальное термодинамическое равновесие, т. е. равновесие в очень малых (элементарных) объемах среды, содержащих все же столь большое число частиц (молекул, атомов и др.), что состояние этих объемов можно охарактеризовать температурой, химическим потенциалом и другими средними термодинамическими параметрами, зависящими от координат и времени. Природные процессы достаточно медленные и обладают меньшими масштабами пространственной неоднородности, чем масштабы корреляции между частицами. Время релаксации, т. е. перехода из неравновесного термодинамического состояния в равновесное, весьма незначительное. Так, для молекулярно однородной жидкой воды это время составляет около 10^{-12} с; в первом приближении средняя квадратичная скорость молекул разных газообразных химических веществ изменяется от 200 до 1800 м/с [5]. Кстати, согласно данным работы [9, с. 284], "...в течение малого времени релаксации в макроскопически малых объемах жидкости устанавливается локальное равновесие, точнее неравновесная функция распределения близка к локально-равновесной и можно найти поправку пропорциональную градиентам температуры, гидродинамической скорости и химическому потенциалу компонентов. Кинетические компоненты оказываются пропорциональными пространственно-временным корре-

ляционным функциям потоков энергии, импульса и вещества данного сорта".

– В-третьих, важнейший постулат, гласящий о термодинамической и статистической устойчивости реальных природных величин, а также устойчивости движения по А. М. Ляпунову [1, 5, 10].

– В-четвертых, весьма важный и требующий экспериментального подтверждения постулат об устойчивости вычислительных операций [1, 5, 9, 10], предусматривающий, что при всех обстоятельствах отношение вычислительных ошибок выхода и входа остается ниже некоторой фиксированной границы. Рассматриваемая устойчивость следует из 2- и 3-го постулатов. По сути вычислительная устойчивость предусматривает отсутствие недопустимого накопления разного генезиса вычислительных ошибок за счет погрешностей исходных значений всех элементов математических моделей, особенно параметров. Отметим, что исходные для математического моделирования параметры, в частности в виде нелинейных зависимостей, могут быть ошибочными, даже неоднозначными прежде всего по причине критериальной необоснованности и недостоверности законов (механизмов) состояния, точнее, методических ошибок, в том числе нарушений принятых ранее постулатов, а также из-за ряда субъективных ошибок. Нельзя не упомянуть погрешности, связанные с гистерезисными явлениями [3, 5], исследования которых обычно не предусматривают оценки достоверности, например физико-химической сути и компетентности размеров (времен) лабораторно испытываемых монолитов грунтов. Кстати, наши натурные наблюдения с учетом решения обратных задач (как наиболее надежных определений) указывают на меньшую значимость этого неравновесного явления, по сравнению с определяемым лабораторным путем. Очевидны также методические погрешности, связанные с особенностью применяемых вычислительных методов, включая приборные погрешности, например, аналоговых вычислительных машин и приборов для опытных определений. Отметим, что для цифровых электронных машин устойчивость может нарушаться из-за округления и деления чисел, близких к нулю.

Целесообразно упомянуть о принципе Ле-Шателье-Брауна, по сути, улучшающем физическую устойчивость состояния исследуемой системы, согласно которому внешнее воздействие, выводящее систему из состояния термодинамического равновесия, вызывает в системе процессы, стремящиеся ослабить эффект воздействия. Между прочим, общее условие термодинамического равновесия – это максимальная энтропия, которая как мера вероятности увязывает последнюю с детерминированностью [9].

Интересно, что на физическую (термодинамическую и статистическую) устойчивость (2- и 3-й постулаты) указывают все осуществляемые натурные и лабораторные наблюдения за состоянием геологической среды (почвогрунтов), в частности за уровнями и напорами подземной воды, всасывающими давлениями и концентрациями поровой влаги. Эти наблюдения всегда дают однозначное устойчивое значение определяемых величин и отражают их гладкое, монотонное изменение в пространстве и времени от обычно циклически повторяемых природно-техногенных факторов. Тем более, хотя бы в первом приближении практически всегда подтверждаются результаты тщательно выполненных прогнозов при помощи математического моделирования.

Подчеркнем, что разрабатываемая тема является весьма многогранной и требует привлечения современных достижений смежных наук (математики, физики, кибернетики, химии, биологии и др.). Существующих гидрогеологических физико-математических моделей, методов их реализации, в том числе приборных устройств и вычислительных машин весьма много. Это же относится к разному происхождению погрешностей. Поэтому в своих исследованиях мы ограничились тремя типовыми физико-математическими моделями и только некоторыми наиболее эффективными методами их реализации. Несомненно, такой выбор исследований имеет некоторый субъективный характер, строго не претендующий на безусловную всеобщую применимость. Хотя мы пытались учесть наиболее сложные природно-техногенные условия с точки зрения пространственно-временной мерности, нелинейности законов массопереноса, ге-

терогенности среды (почвогрунтов), количества учитываемых явлений.

Теперь рассмотрим каждый в отдельности рекомендуемый нами критерий. Начнем с критерия о *физико-химической сущности*. Так как основным объектом наших исследований являются почвогрунты, т. е. горные породы, подлежащие хозяйственной деятельности, то правильнее назвать этот критерий геологической определенностью с точки зрения названия, сути, размерностей, происхождения, изменения численных значений. Поскольку современные геологические (гидрогеологические) справочники [2] не характеризуют всех возможных природно-техногенных процессов и явлений, требуется привлечение смежных наук [1, 4, 9, 10 и др.]. Поэтому при оценке данного критерия немаловажное значение имеют общая эрудиция и интуиция исследователя. Несомненно, этот критерий прежде всего обусловлен рекомендуемыми постулатами и уравнениями, характеризующими исходные физико-математические модели.

Указанный критерий важен, потому что значительно облегчает логику необходимых обоснований пессимистических (худших) и оптимистических параметров по известным крайне возможным численным значениям, что позволяет по результатам математического моделирования прогнозировать худшие значения прогнозных величин, гарантирующие надежные инженерные мероприятия. Безусловно, достоверные параметры могут быть сугубо расчетными, но они трудно поддаются логической интерпретации и пока нами не учитываются. Кстати, анализ физико-химической сущности исходных для моделирования параметров часто позволяет обосновать их крайне возможные числовые значения. В частности, объемных влагосодержаний и коэффициентов влагопереноса (фильтрации) грунтов, многочисленная информация о которых в настоящее время накоплена во многих литературных и фондовых источниках.

К тому же последнее утверждение позволяет увеличением параметрических ошибок условно учитывать нашу непознанность объекта исследований.

Критерий о детерминизме (закономерности, причинности), т. е. 100%-ной вероятности однозначной оценки численного зна-

чения изучаемой величины, объясняется требованиями принятых постулатов, особенно о локальном равновесии, и главным образом следует из представления о детерминизме законов (механизмов) исследуемых процессов и явлений. На элементарном (молекулярном) уровне речь идет не о закономерности поведения отдельной элементарной частицы среды, а об определенном ансамбле этих частиц, точнее, средних значений поведения. Кстати, в физике указанное явление рассматривается как флуктуация, под которой подразумевается отклонение истинного значения физической величины, характеризующей систему, от его среднего значения. Мерой флуктуации является средний квадрат этой разности, называемый квадратной флуктуацией [4, 9, 10], указывающий на то, что если флуктуации истинной величины малы, то большие отклонения маловероятны. При этом, если система состоит из N независимых частей, то относительная флуктуация любой аддитивной функции состояния системы обратно пропорциональна квадратному корню из числа ее частей. Обычно для оценки вероятности флуктуации используется распределение Гаусса, классическая формула в теории вероятности [5, 9], позволяющая принципиально оценить устойчивость однородного вещества, испытывающего флуктуацию температуры, объема, плотности, наконец, количества элементарных частиц. Представление о флуктуации широко применяется для определений предела чувствительности высокочувствительных приборов. Именно возможность оценки флуктуации от количества элементарных частиц системы, усредненные свойства которых однозначно характеризуют то либо иное детерминированное (не случайное) состояние, предлагается для количественной оценки определения критерия о детерминированности. Кстати, проведенные нами расчеты подтвердили, в частности для суглинков (наиболее распространенных грунтов на территории Украины) объемом 1 дм^3 (10^{-3} м^3), возможность детерминированности объемных влагосодержаний паробразной влаги и жидкой влаги, концентрации поровых жидких растворов. Тем самым подтверждается компетентный характер принимаемого для исследований размера.

Вышеизложенным мы затронули представление о *критерии компетентности элементарных размеров (времен)*, обусловленном 2-м постулатом достоверности. Это важный критерий, но в большинстве случаев он не учитывается в гидрогеологических исследованиях. Более логично предположить, что физически осмысленные компетентные элементарные размеры (времена) определяют достоверность пространственных и временных шагов наиболее популярных и универсальных конечноразностных, в частности неявных вычислительных методов. Обратим внимание, что сегодня не существует строгих формул определения компетентных элементарных размеров (времен) для конкретных геологических сред (почвогрунтов). Для их надежного количественного определения пока необходимо проводить эмпирические, опытные и математические эксперименты. Сейчас нами уже накоплен определенный эмпирический опыт. Так как имеем дело с разной мерностью трехмерного пространства, под размером предполагается объем, площадь и линия. Причем при идеальной пространственной компетентности и полном хаотическом поведении определяемых величин относительные значения этих разномерных характеристик должны стремиться к постоянству. Имеется в виду равенство отношений гомогенных значений по всему размеру образца гетерогенного почвогрунта. В частности, это касается средних значений пористости, смоченных сечений и т. п. Компетентность времени определяется цикличностью, повторяемостью наблюдаемых и прогнозных физических величин.

Подоюживая сказанное о критериальной компетентности размеров (времен), укажем на большое различие их значений, обусловленное, прежде всего, масштабом математического моделирования, требующего специфических методов определения исходных параметров, в свою очередь зависящих от разного уровня неоднородностей. Например, для локальных моделей, в частности при исследовании влагосолепереноса, важна неоднородность реальной пористости, трещиноватости, а для решения региональных прогнозных задач значимой становится роль региональных факторов. Так как для региональных за-

дач достоверное определение параметров фильтрации оценивается на основании результатов опытных откачек, то достоверные компетентные объемы равноценны размеру охваченной откачкой толщи водоносных отложений. Обычно радиус этой области возмущения водоносного горизонта достигает свыше десятков метров. В то же время компетентный объем лабораторных монолитов для локальных моделей обычно изменяется от $n \cdot 10^{-5} \text{ м}^3$ (10 см^{-3}) до $n \cdot 10^{-3} \text{ м}^3$ [5].

Наконец, наиболее важным критерием достоверности является *точность опытных определений* и, несомненно, *точность результатов математического моделирования*, точнее, суммарные погрешности, обуславливающие возможный интервал "истинных" значений определяемых величин. Отметим некоторые основные выводы, полученные нами и другими исследователями. Так, в каждом конкретном случае эти погрешности могут изменяться по пространству и времени в широком диапазоне значений. Ошибки за счет параметров наиболее существенно сказываются вблизи граничных условий I и II родов. При этом граничные условия III рода, реализуемые так называемым методом дополнительных сопротивлений, пропорционально реагируют не только на физическое свойство среды, но также на характер пространственного усложнения движения, учет которого предусмотрен указанным методом. Нулевое значение параметра – всегда одно из возможных крайних его значений. Напомним, что параметры при математическом моделировании обычно реализуются кусочно-постоянным способом, т. е. принимаются постоянными за расчетный интервал времени для всего так называемого расчетного блока.

Результирующая погрешность математического моделирования зависит от взаимодействия всех составляющих элементов реализуемых исходных уравнений массопереноса. Значит, в зависимости от так называемой чувствительности влияния этих элементов погрешности прогнозных решений могут не совпадать с погрешностями исходных задаваемых величин. Особенно это касается исходных параметров. В ряде случаев параметрические ошибки в несколько сотен процентов оказывали допустимую

погрешность прогнозных величин в несколько процентов. Поэтому анализ чувствительности необходим, но пока требует серьезных многовариантных математических экспериментов.

Подчеркнем, что используемые для доказательства достоверности "истинности" сравнения эпигнозных модельных решений с натурными определениями имеют смысл только тогда, когда доказана достоверность первых. Очевидно, что, наряду с параметрическими ошибками, важнейшее значение приобретают вычислительные ошибки, связанные с методами реализации исходных моделей, точнее, методами решения, в общем случае, систем исходных уравнений, включая погрешности за счет особенностей вычислительных машин, используемых в случае сложных моделируемых систем.

Напомним, что появившаяся возможность учитывать неполноту исходной информации дополнительными погрешностями исходных параметров позволяет оценить закономерные пространственно-временные изменения прогнозных ошибок, в частности на основании многовариантных решений, а также подтверждает правомочность применения разрабатываемой нами концепции пессимистическо-оптимистических решений сложных гидрогеологических задач массопереноса и массообмена.

Как показывает опыт, аналоговые вычислительные машины, реализующие устойчивые от накопления ошибок за счет округлений и делений на числа, близкие к нулю, обычно обладают приборными техническими погрешностями около 0,1–10%. В частности БУСЭ-70 и АВНУ, реализующие неявные конечноразностные схемы решения при расположении хотя бы 4–5 расчетных точек между граничными условиями I рода и 9–10 дискретными аппроксимациями нелинейных коэффициентов влагопереноса, позволяют выполнить решения определяемых специальных функций с точностью 0,1–0,2%. Значит, решать нелинейные гидрогеологические задачи конечноразностным методом вполне возможно, более оптимально подбирая пространственные и временные шаги. То же можно утверждать об устойчивых явных и явно-неявных расчетных схемах, используемых при помощи цифровых вычислительных машин, склон-

ных к накоплению ошибок за счет округлений и деления на близкие к нулю числа.

Наиболее перспективным для математического моделирования можно считать конечноразностный метод по доказанному по устойчивости (сходимости к "истинному" конечноразностному значению по неявной схеме) явных и явно-неявных расчетных схем. Тем более равномерное (одинаковое) уменьшение пространственных и временных шагов приводит к уменьшению собственно конечноразностных погрешностей и получению решений с требуемой точностью.

Безусловно, наиболее достоверным является прогнозный вычислительный метод, реализующий исходную физико-математическую модель с требуемой точностью, в первом приближении равную 0,5–1,0%. В этом отношении хорош операционный метод, в частности с использованием преобразований Лапласа.

Принципиально обязательным является пессимистическое решение, т. е. самое худшее с точки зрения проведения необходимых хозяйственных и природоохранных мероприятий. Это значительно облегчает проведение математического моделирования как количественного прогнозного метода решений. Оптимистические же решения важны главным образом для увязки с требуемой точностью, точнее, допустимыми погрешностями прогнозных величин, пригодными для хозяйственных целей и обоснования дополнительных трудоемких исследований.

Несколько десятилетий тому назад многих исследователей шокировало появившееся утверждение о том, что даже дифференцирование не позволяет получить строгое теоретическое истинное решение. Это утверждение следовало из представления производной в виде бесконечно сходящегося ряда Тейлора [1, 6]. Чтобы выйти из этого щекотливого положения, была предложена формулировка абсолютно корректного, по Адамару, однозначного решения, согласно которой метод решений должен обладать устойчивостью к накоплению ошибок и быть сходимым с точным истинным результатом решения. Подчеркнем, что последнее учитывается 4-м постулатом достоверности, предложенным нами. К то-

му же некорректность с точки зрения неоднозначности может быть также обойдена, если предполагаемую многозначность рассматривать в виде допустимой требуемой погрешности [6, 7]. Именно правомочности этих так называемых условных некорректных задач соответствует предлагаемая нами концепция пессимистических и оптимистических решений. Кстати, устойчивое решение не всегда строго сходимое. Например, конечноразностный неявный метод, который всегда методически устойчивый, принципиально может не сходиться в случае накопления ошибок в результате округления и деления на близкие к нулю числа, что свойственно вычислительным операциям на цифровых вычислительных машинах.

Обобщение всего изложенного позволяет представить, в общем виде, методику достоверного математического моделирования, отличающуюся от общепринятых традиционных методик учетом рекомендуемых критериальных требований и постулатов достоверности, согласно которым обязательно требуется на первом этапе обоснование исходных математических моделей, пригодных прежде всего для пессимистических прогнозных и эпигнозных решений, а также и для оптимистических и при средних погрешностях исходных задаваемых параметров и других элементов моделируемой системы. Обязательным методическим требованием является доказуемость устойчивости выполняемых вычислительных прогнозных операций. Весьма желательно, хотя бы предположительно, осветить требуемую точность решения.

Наш опыт подтверждает возможность осуществления достоверных результатов математического моделирования сложных процессов водной миграции веществ в геологической среде. Наиболее перспективный подход заключается в применении персональных цифровых компьютеров, реализующих конечноразностный метод по устойчивым явно-неявным схемам и обеспечивающих сходимость к неявному решению с последующим контролируемым равномерным уменьшением пространственных и временных дискретных шагов. Прежде всего, необходимо осуществлять пессимистическое решение, основанное на ухудшенных значениях исходных параметров, начальных

и граничных условий, внешних и внутренних источников массообмена веществ, обеспечивающих неблагоприятный приход-уход-накопление в исследуемом пространстве геологической среды. Основным методом учета локального усложненного по мерности движения веществ служит метод дополнительных сопротивлений, основанный на строгих аналитических формулах либо реализации специальных локальных моделей. Прежде всего, вычислительные операции выполняются путем задания пессимистических значений модельных характеристик. При этом возможно несколько вариантов такого решения по причине логической неопределенности каких-либо характеристик. Всегда желательно при учете многочисленных механизмов миграции предварительно хотя бы качественно оценить роль (значимость) каждого из них, чтобы в дальнейшем исключить их при моделировании с целью упрощения последнего. Кстати, согласно принципам Ле-Шателье, в природе одновременно значимыми может быть лишь ограниченное количество явлений, так как их большинство взаимно скомпенсировано. Схематизируя природно-техногенные гидрогеологические условия, надо стремиться максимально доказуемо упростить изучаемые процессы. Однако не только исключением заведомо незначительных механизмов миграции, но также путем линеаризации нелинейных механизмов, уменьшением мерности, вплоть до применения одномерной "трубки тока" и т. п.

Обычно усложнение решений миграционных задач происходит за счет:

1. Физико-математических особенностей:

1.1. Пространственно-временных многомерностей.

1.2. Нелинейности механизмов (законов) по параметрам и действующим силам.

1.3. Неоднородности свойств, определяющих параметры и граничные условия.

1.4. Гетерогенности изучаемой среды.

1.5. Неустойчивости (лабильности) процессов.

2. Математического характера:

2.1. Погрешностей параметров.

2.2. Математической неустойчивости вычислений (накоплений ошибок при вычислениях).

2.3. Возможностей персональных компьютеров, в том числе аналоговых вычислительных машин, т. е. технических ошибок.

2.4. Пространственно-временной дискретности.

2.5. Неустойчивости и несходимости применяемых итерационных формул, в частности явных схем решений.

Подчеркнем, что выполненные нами за последнее 50-летие научные разработки обычно в той либо иной мере касались вопросов достоверности проводимых исследований. Особенно обоснование термодинамического представления о давлении как универсального для оценки состояния веществ в гетерогенной геологической среде, обобщенного закона фильтрации и влагопереноса, законов (механизмов) сорбции и десорбции, методики математического моделирования нелинейных процессов на сконструированных аналоговых вычислительных машинах (БУСЕ-70, АВНУ – аналоговое вычислительное нелинейное устройство), ряда аналитических формул расчета обобщенного для фильтрации и влагопереноса объемного влагосодержания и коэффициента переноса в насыщенно-ненасыщенных почвогрунтах и др. Кстати, разрабатываемое нами представление о достоверности результатов корректного решения типовых гидрогеологических задач потребовало ввести новые или усовершенствовать понятийность ряда традиционных терминов. В частности, понятие о таких терминах, как величина, компетентный элементарный размер (время), достоверность, закон (механизм).

Достоверность – подлинность, точность, т. е. понятие, предусматривающее для исследуемых величин выяснение физико-химической сущности, причинной обусловленности (детерминизма), компетентных размеров (времен), точности опытных определений (наблюдений и экспериментов), а также вычислительных операций.

Закон (механизм) – постоянная в пространственно-временном отношении, идеализированная (без ошибок), детерминированная (причинная со 100%-ной вероятностью), изначальная для исследований, одно- или многочленная однозначная зависимость определенного состояния (объемных или массовых содержаний, ско-

ростей движения, расходов) вещества от воздействующих сил разного происхождения, эмпирически подтвержденная, теоретически доказанная и пригодная для решения широкого круга задач.

Компетентные элементарные объемы (время) – это минимальные объемы (время) в некотором интервале компетентной области, характерные для оценки всех параметров физико-математической модели геологической среды, увязанные с целенаправленностью работ, требуемой точностью, особенностью (размером, формой, взаимным расположением) опытных датчиков и опробованных образцов (монолитов) почвогрунтов. Под компетентной исследуемой областью мы подразумеваем область, характеризующуюся такими элементарными объемами, для которых средние параметры с учетом времени изменяются непрерывно, равномерно и могут быть применены для математического описания, в том числе гидрогеологических условий.

Физическая величина – характеристика физических объектов или явлений материального мира, общая для множества объектов или явлений в качественном отношении, но индивидуальная в количественном отношении для каждого из них. В общем случае она обладает названием, физико-химической сутью, размером (числом), размерностью, пространственно-временными координатами, тензорами разного ранга (в частности, скалярностью и векторностью), а также рядом специфических свойств (в частности, интенсивностью и экстенсивностью, аддитивностью, коммутативностью, монотонностью, ассоциативностью сложения и др.), и, наконец, символическими обозначениями.

Недостаточно исследованным остается вопрос, касающийся требуемой точности. Так, если граничные условия предусматривают особенности проектируемых хозяйственных и природоохранных мероприятий (в частности, глубину, расположение, режим работы осушительных дрен), а также возможные изменения параметров среды, то вычисляемая ошибка значений прогнозируемых функций состояния моделируемой системы будет указывать на требуемую точность. Тогда возникает возможность оценки целесообразности специальных научных

исследований путем сравнительной оценки затрат на осуществление математического моделирования и дополнительных опытных исследований, предполагаемого строительства и эксплуатации инженерных мероприятий. Кстати, мы придерживаемся мнения, что именно пессимистические результаты решений должны учитываться в обосновании проектируемых мероприятий, а оптимистические решения не оправдываются предполагаемым усовершенствованием хозяйственных приемов.

Отметим главный наш вывод, хотя и несколько субъективный, о том, что современный научный и технический потенциал с учетом накопленной параметрической информации позволяет решать конкретные гидрогеологические задачи с требуемой точностью, обуславливаясь только необходимыми капиталовложениями. Опираясь на многолетнее и краткосрочное прогнозирование, сейчас надежно можно обосновать не только планирование, но и регулирование оптимальными водно-солевыми режимами почвогрунтов, т. е. осуществлять управление состоянием геологической среды.

Несмотря на то, что, в общем случае, ошибки прогнозируемых величин могут изменяться в весьма широком диапазоне значений, для конкретных гидрогеологических условий применяемое математическое моделирование позволяет обеспечить суммарную погрешность не более 10–20%. Мы исходим из научно-технической оснащенности нашей лаборатории техногенной гидрогеологии Института геологических наук НАН Украины. При этом параметрические погрешности известных по литературе и разным информационным фондам исходных для прогнозного математического моделирования величин могут достигать 50% и выше.

В заключение отметим, что назрела необходимость дальнейшего усовершенствования количественной оценки критериев достоверности, а также разработки достоверных методик прогнозных решений сложных малоизученных миграционных задач, в частности нелинейного совместного массопереноса воды и загрязняющих нефтепродуктов в насыщенно-ненасыщенных водоносными грунтами приповерхностного слоя земли.

1. *Бронштейн И. Н., Семендяев К. А.* Справочник по математике. – Лейпциг: Тойбнер; М.: Наука, 1981. – 719 с.
2. *Геологический словарь.* – М.: Госнаучтехиздат, 1960. – Т. 1. (А–Л). – 402 с.; Т. 2. (М–Я). – 445 с.
3. *Огняник Н. С., Парамонова Н. К., Брикс А. Л. и др.* Основы изучения загрязнения геологической среды легкими нефтепродуктами. – Киев: А.П.Н., 2006. – 278 с.
4. *Политехнический словарь.* – М.: Сов. энцикл., 1989. – 621 с.
5. *Ситников А. Б.* Вопросы миграции веществ в грунтах. – Киев, 2010. – 640 с.
6. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. – М.: Наука, 1979. – 285 с.
7. *Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики. – М.: Наука, 1972. – 705 с.
8. *Ушаков Д. Н.* Большой толковый словарь современного русского языка: 180 000 слов и словосочетаний. – М.: Альта-Принт, ДОМ. XXI век, 2008. – 1239 с.
9. *Физический* энциклопедический словарь. – М.: Сов. энцикл., 1984. – 944 с.
10. *Химический* энциклопедический словарь / Гл. ред. Кнунянц И.Л. – М.: Сов. энцикл., 1983. – 791 с.

Ин-т геол. наук НАН Украины,
Киев
E-mail: geoj@bigmir.net

Статья поступила
29.09.11