

СОЗДАНИЕ ПРИНЦИПОВ И МЕТОДОВ ПОДХОДА К ФОРМИРОВАНИЮ КОМПЬЮТЕРНЫХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ СИСТЕМЫ «ОЗ. БАЙКАЛ – ОКРУЖАЮЩАЯ СРЕДА (ПОТОКИ)»

Астраханцева О.Ю.

Институт геохимии им. А.П. Виноградова СО РАН, г. Иркутск, e-mail: astra@igc.irk.ru

Важнейшая теоретическая проблема гидрогеохимии – изучение механизма процессов формирования химического состава природных вод континентальных водоемов, а так же прогнозирование качества вод при различных режимах их эксплуатации.

Цель наших исследований – создание имитационных моделей процессов формирования химического состава природных вод оз. Байкал методами компьютерного физико-химического моделирования.

Средство для такого исследования существует – алгоритм физико-химического моделирования эволюции системы локально-равновесных резервуаров, связанных потоками подвижных групп фаз [Кулик и др., 1992; Чудненко, 2007] с положенной в его основу теорией стабильных стационарных мегасистем [Карпов, 1981] и универсальный инструмент для решения широкого круга задач физико-химического моделирования – программный комплекс «Селектор». Учитывая, что исследования физико-химических свойств системы «оз. Байкал–окружающая среда (потоки)» методом компьютерного физико-химического моделирования еще никем ранее не проводились, перед исследователями была поставлена задача разработать принципы и методы подхода к формированию компьютерных физико-химических моделей системы «оз. Байкал–окружающая среда (потоки)».

Формирование моделей начинается с начального этапа – геолого-геохимической модели сложной системы «оз. Байкал–потоки», создание которой обуславливает необходимость определения баланса масс–количества вещества в водах озера и потоках, поступающих и вытекающих из озера, и установления особенностей миграции и аккумуляции компонентов, поступающих в озеро с потоками. В связи с этим были поставлены следующие задачи: 1) провести рациональное районирование: выделить равновесные системы в озере Байкал – резервуары со стабильными физико-химическими параметрами (температурой, давлением, химическим составом), обменивающиеся потоками вещества и энергии; 2) создать водную балансовую модель всех потоков и систем мегасистемы «Оз. Байкал»; 3) составить информационную модель для объектов исследования: установить состояние природного фона систем и потоков мегасистемы «Озеро Байкал» в отрезок времени, предшествующий активным антропогенным нагрузкам; 4) рассчитать химические балансы всех резервуаров и потоков мегасистемы «Оз. Байкал»; 5) создать базы данных количества вещества в системах и потоках в г/год и моль/год.

Разработана блок–схема этапов формирования компьютерной физико-химической модели оз. Байкал [Астраханцева, 2003; Астраханцева и др., 2010].

Согласно постулатам химической термодинамики стабильные свойства внутренней среды системы (температуру, давление, химический состав вод, массу) можно определить только в состоянии ее химического и термического равновесия [Garrels, 1960]. В такой открытой системе, как оз. Байкал, равновесному состоянию отвечает термическое равновесие в его водах. Известна модель термодинамической мегасистемы В.И. Верболова с соавторами, которые впервые применили подход к оз. Байкал как к мегасистеме, состоящей из районов – систем с индивидуальными стабильными термическими характеристиками [Верболов и др., 1965]. Эту методологию мы и взяли за основу.

Было определено состояние внутренней среды систем (поверхностных, прибрежных, глубинных, придонных вод пяти резервуаров озера: Южного, Селенгинского, Среднего, Ушканьеостровского, Северного) мегасистемы «Оз. Байкал» [Астраханцева и др., 2010]. Определен их равновесный фазовый и компонентный состав. Во взятой за основу

многорезервуарной термодинамической модели оз. Байкал, по методу термодинамического анализа водных минеральных систем Р. Гаррелза [Garrels, 1960], через физико-химические параметры проведена оценка геохимического состояния системы оз. Байкал. Рассчитанные химические равновесные модели показали, что характеристики геохимических сред – общая минерализация, характеристики кислотно-основных и окислительно-восстановительных состояний, а также концентрации форм нахождения компонентов в этих водах являются индивидуальными для каждого резервуара. По физико-химическим условиям формирования новообразованного вторичного вещества и характеру геохимической среды озеро Байкал является многорезервуарной системой.

Морфология озера – сложный рельеф дна и, соответственно, перепады глубин – определяет своеобразие и особенности гидродинамических процессов, градиентов температуры, давления, интенсивности водообмена, количества вещества и характер геохимической среды вод и донных отложений во всех пяти его резервуарах: Южном, Селенгинском, Среднем, Ушканьеостровском, Северном.

Озеро Байкал – динамическая мегасистема, работающая в стационарном режиме (постоянство своего неравновесного состояния), состоящая из равновесных термодинамических систем со стабильными физико-химическими характеристиками. Модель степени протекания процесса в глобальной мегасистеме «оз. Байкал–потоки» представляется как совокупность последовательно связанных потоками водного раствора реакторов – резервуаров [Астраханцева и др., 2010]. Стабильность мегасистемы обусловлена локальным равновесием в системах (поверхностные, прибрежные, глубинные, придонные воды) пяти резервуаров оз. Байкал. Объект нашего исследования – мегасистема «оз. Байкал–окружающая среда (потоки)» – совокупность геохимических процессов, происходящих в результате обмена энергией при взаимодействии вещества вод резервуаров оз. Байкал и вещества входящих и выходящих потоков (аэрозоль, дождь+снег, реки, речная взвесь, подземные воды, минеральные воды, приток озерных вод из соседних резервуаров озера, потоки из донных отложений, сток озерных вод в соседние резервуары озера или в реку Ангару, потоки в донные отложения). Стационарных систем (параметры которых не менялись бы со временем) в природе не бывает, но можно выбрать интервал времени, в течение которого система может считаться стационарной, т.е. обладающей временной стационарностью. Годичный цикл климатических характеристик окружающей среды, в которой находится объект нашего исследования (оз. Байкал), обуславливает выбор единицы меры времени – 1 год – время периодически повторяющихся процессов. Следовательно, системы «резервуары оз. Байкал–потоки» сохраняют во времени свои среднегодовые физико-химические характеристики стабильными. Среднегодовые содержания компонентов в системах и потоках мегасистемы «Оз. Байкал–потоки» являются нужными нам химическими составами компонентов, т.е. термодинамическими параметрами. Разработана методика расчета среднегодового химического состава независимых компонентов в потоках и системах для физико-химической модели «Озеро Байкал» [Астраханцева, 2003; Астраханцева и др., 2010]. Существующий разрозненный эмпирический материал по водам, донным отложениям и потокам озера Байкал приведен в систему – на большом фактическом материале установлено состояние природного фона систем и потоков мегасистемы «Озеро Байкал» в отрезок времени, предшествующий активным антропогенным нагрузкам, – созданы среднегодовые базы данных по содержанию в мг/л и моль/кг макро-, микро-, биогенных элементов и органического вещества (Na^+ , K^+ , Ca^{2+} , Mg^{2+} , Al , Si , Mn^{2+} , $\text{Fe}_{\text{общ}}$, SO_4^{2-} , HCO_3^- , Cl^- , NO_3^- , PO_4^{3-} , H^+ , O_2 , As , B , Cr , Cu , Cd , Hg , Pb , Sr , Zn , Co , U , V , Br , Rb , Mo , $\text{C}_{\text{орг}}$, $\text{N}_{\text{орг}}$, $\text{P}_{\text{орг}}$, $\text{S}_{\text{орг}}$, CO_2 , Ti) в системах и потоках многорезервуарной системы «Оз. Байкал» [Астраханцева, 2002, 2004];

Рассчитаны морфометрические характеристики резервуаров оз. Байкал [Астраханцева, 2007а], проведена количественная оценка масштабов движения подземных вод в земной коре водосборных бассейнов резервуаров озера, которая позволила оценить масштабы подземного химического выноса [Астраханцева, 2007]; оценена интенсивность водообмена в резервуарах

и водные балансы потоков, выпадающих и вытекающих из резервуаров [Астраханцева, Глазунов, 2008], оценена внутренняя нагрузка – потоки из донных отложений и потоки в донные отложения в резервуарах [Астраханцева и др., 2009].

Выявлено среднее значение постоянной времени обмена вод для каждого резервуара: в Северном резервуаре – около 386 лет; в Ушкуньеостровском – около 129 лет; в Среднем – около 287 лет; в Селенгинском – около 25 лет; в Южном – около 96 лет [Астраханцева, Глазунов, 2008]. Водообмен – неотъемлемый фактор формирования химического состава воды, который определяет время взаимодействия воды с горными породами и органическим веществом и контролирует направленность взаимодействия в системах «воды резервуаров оз. Байкал–потоки». Чем больше величина времени обмена вод в резервуарах, тем большее количество компонентов, поступающих в резервуар и вступающих во взаимодействие с веществом вод резервуара связывается – вступает в реакции комплексообразования, переходит из растворенной в твердую фазу и остается в резервуаре. Самое большое количество рассеивающихся компонентов (мигрирующих только одним способом – в растворенных формах) и легко выносящихся из резервуара – в Селенгинском резервуаре, и, наоборот, в Северном резервуаре количество связанных компонентов, перемещающихся в растворенной и твердой фазе, наибольшее.

На данном этапе исследования рассчитаны химические балансы резервуаров и потоков мегасистемы «Оз. Байкал», созданы базы данных количества вещества в системах и потоках в г/год [Астраханцева и др., 2010-2012], сделаны следующие выводы.

Основные источники вещества – потоки – в резервуарах генетически разные.

Кроме внешних прихода и расхода вещества в резервуар и из резервуара в Южном, Селенгинском, Среднем, Ушкуньеостровском, Северном резервуарах существуют внутренние нагрузки (большие в четырех резервуарах и ничтожная в Селенгинском). Потоки из донных отложений в резервуарах являются основными поставщиками биогенных элементов, органического вещества, катионов, группы микроэлементов.

В каждом резервуаре определен круг компонентов, совершающих биогеохимические круговороты в водах резервуара [Астраханцева и др., 2010-2012].

С точки зрения химического взаимодействия установлены следующие группы компонентов: активные – существуют в водах резервуара во взвешенных и растворенных формах, основное их количество приходит в растворенных формах с потоком из донных отложений и полностью вступает в реакции комплексообразования; умеренно активные компоненты – существуют в водах резервуара во взвешенных и растворенных формах, поступают в резервуар с внешними и внутренними потоками, в разной степени вступают в реакции комплексообразования; инертные компоненты – не участвуют в реакциях комплексообразования, в водах резервуара находятся и мигрируют только в растворенных формах, поэтому легко выносятся из резервуара. Остальные компоненты перемещаются и в растворенной и в виде твердой фазы, но с различным для каждого элемента соотношением растворенных и твердых фаз [Астраханцева и др., 2010-2012]. Установлены пути миграции компонентов в резервуарах оз. Байкал [Астраханцева и др., 2010-2012]. По скорости водной миграции компоненты в резервуарах (от минимальной к максимальной) образуют следующие ряды:

в Южном: $(Al, Si, Mn^{2+}, Fe_{общ}, NO_3^-, P_{мин}, As, Cr, Cu, Pb, Co, V, Rb, P_{орг}, Ti) \rightarrow (K^+, Na^+, C_{орг}, S_{орг}) \rightarrow (Mg^{2+}, Cd, Br, Zn, U, N_{орг}) \rightarrow (Ca^{2+}, HCO_3^-, SO_4^{2-}, Cl^-, B, Hg, Sr, Mo)$;

в Селенгинском: $(Mn^{2+}, Fe_{общ}, Co, Ti, P_{мин}, Rb, As, V) \rightarrow (Cr, NO_3^-, Al, Si) \rightarrow (U, Mo, P_{орг}, Cd, K^+, B) \rightarrow (N_{орг}, Pb, Na^+, Br, Mg^{2+}, S_{орг}, C_{орг}) \rightarrow (Ca^{2+}, Sr, Cu, Hg, Cl^-, SO_4^{2-}, Zn, HCO_3^-)$;

в Среднем: $(Al, Si, Mn^{2+}, Fe_{общ}, P_{мин}, Co, Rb, Ti, NO_3^-, As, Cr, Cu, Cd, Pb, V, P_{орг}, U) \rightarrow (K^+, Br, N_{орг}, C_{орг}, S_{орг}, Na^+, Mg^{2+}, B) \rightarrow (Mo, Ca^{2+}) \rightarrow (Sr, SO_4^{2-}, Hg, Zn, Cl^-, HCO_3^-)$;

в Ушкуньеостровском: $(Al, Si, Mn^{2+}, Fe_{общ}, P_{мин}, Co, Ti, Cr, Pb, Cu, NO_3^-, As, V, Rb, P_{орг}) \rightarrow (Zn, Br, Mo, K^+, Cd, U, N_{орг}, Na^+, Mg^{2+}) \rightarrow (S_{орг}, C_{орг}) \rightarrow (B, Ca^{2+}, Hg, Sr, SO_4^{2-}, Cl^-, HCO_3^-)$;

в Северном: $(Mn^{2+}, Fe_{общ}, P_{мин}, Al, Si, Ti, Co, NO_3^-, As, Cr, Cu, V, Cd, Rb, Pb, Br, P_{орг}, K, Zn, U) \rightarrow (Cd, Na^+, N_{орг}, Mg^{2+}, C_{орг}, S_{орг}, Mo, Ca^{2+}) \rightarrow (Hg, SO_4^{2-}, Sr, Cl^-, HCO_3^-)$

Литература

- Астраханцева О.Ю. Принципы создания модели «Мегасистема «Оз. Байкал», база данных // Проблемы земной цивилизации. Сборник статей «Поиск решения проблем выживания и безопасности Земной цивилизации». Вып.6, ч.1. – Иркутск, ASPrint, 2002. С. 72-121.
- Астраханцева О.Ю. Создание физико-химической модели «Мегасистема «Оз. Байкал». Выделение полуавтономных подсистем в озере Байкал // Бюллетень ВСНЦ СО РАМН. 2003. №7. С. 124-129.
- Астраханцева О.Ю. База данных химического состава вод и потоков оз. Байкал // Экосистемы и природные ресурсы горных стран. Материалы Первого Междунар. симпоз. «Байкал. Современное состояние поверхностной и подземной гидросферы горных стран». – Новосибирск: Наука. 2004. С. 233-260.
- Астраханцева О.Ю. Количественная оценка потока «Подземные воды», впадающего в озеро Байкал, для пяти резервуаров озера Байкал: Южного, Селенгинского, Среднего, Ушканьеостровского, Северного // Вестник ИрГТУ. 2007. № 3 (31). С.15-21.
- Астраханцева О.Ю. Расчет морфометрических характеристик сложной системы «Озеро Байкал» // Вестник ИрГТУ. 2007а. № 4 (32). С.42-49.
- Астраханцева О.Ю., Глазунов О.М. Водный баланс мегасистемы «Озеро Байкал». Вестник ИрГТУ. 2008. № 3 (35). С. 148-154.
- Астраханцева О.Ю., Тимофеева С.С., Глазунов О.М. Химические балансы пяти резервуаров озера Байкал // Вестник ИрГТУ. 2009. № 1 (37). С. 11-23.
- Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Выделение полуавтономных систем в озере Байкал // Вестник ИрГТУ. 2010. № 4 (44). С. 6-16.
- Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Химический баланс Южного резервуара озера Байкал // Вестник ИрГТУ. 2011. № 8 (55). С. 16-28.
- Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Химический баланс Селенгинского резервуара озера Байкал // Вестник ИрГТУ. 2012. № 1 (60). С. 20-32.
- Астраханцева О.Ю., Чудненко К.В., Глазунов О.М. Химический баланс Среднего резервуара озера Байкал // Вестник ИрГТУ. 2012. № 3 (62). С. 18-30.
- Верболов В.И., Сокольников В.М., Шимараев М.Н. Гидрометеорологический режим и тепловой баланс оз. Байкал. – М.-Л.: Наука, 1965. – 373 с.
- Карпов И.К. Физико-химическое моделирование на ЭВМ в геохимии. –Новосибирск: Наука. 1981. – 247с.
- Кулик Д.А., Чудненко К.В., Карпов И.К. Алгоритм физико-химического моделирования эволюции системы локально-равновесных резервуаров, связанных потоками подвижных групп фаз // Геохимия. 1992. № 6. С. 858-879.
- Чудненко К.В. Теория и программное обеспечение метода минимизации термодинамических потенциалов для решения геохимических задач Дисс... доктора г.-м. наук. ИрГТУ, 2007. – 385с.
- Garrels R.M. Mineral equilibria at low temperature and pressure. – New York: Harper, 1960. – 306 p.