

А. С. Сеннов

К ВОПРОСУ ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ ГИДРОГЕОЛОГИЧЕСКОГО ПРОГРАММНОГО ОБЕСПЕЧЕНИЯ

Сколько-нибудь серьезное исследование в области гидрогеологии в настоящее время невозможно без использования специализированного программного обеспечения (ПО). Обычно такое обеспечение разделяют на группы: 1) для гидродинамического моделирования, 2) для гидрохимического моделирования, 3) вспомогательное, например, предназначенное для обработки данных опытных работ, построения разрезов, и т. д. [1–4]. Обзор ПО типа геоинформационных систем (ГИС) и систем управления базами данных (СУБД), применяемых в гидрогеологии, в данном обзоре опущен в силу их более общего характера.

Так как разработка специализированного ПО требует больших затрат по всем необходимым видам ресурсов, в практической деятельности гидрогеологи используют, как правило, ПО, разработанное в одном из специализированных центров, число которых вряд ли превышает несколько десятков. На наш взгляд, одними из серьезных показателей уровня квалификации разработчиков являются наличие у них *web-сайта*, а также качество представленной на нем информации.

Так, наибольший объем информации традиционно отмечается на американских сайтах, например, Геологической службы – http://water.usgs.gov/software/ground_water.html, Агентства по охране окружающей среды (EPA) <http://www.epa.gov/ada/csmos/modeldescr.html>, Международного центра гидрогеологического моделирования в Колорадо <http://www.mines.edu/igwmc/> и некоторых других. Относительно полные списки ссылок можно найти, в частности, на специальных их страницах, соответственно <http://water.usgs.gov/partnerships.html>, <http://www.epa.gov/ada/links.html>, и <http://typhoon.mines.edu/link/>.

Так, на странице, посвященной гидрогеологическому ПО на сайте Геологической службы США (USGS), представлены в свободном доступе 35 программ в Windows, Linux, Sun, Mac, Dos версиях, в том числе и с исходным кодом. Среди них популярная MODFLOW версии 2005 и предыдущих лет, предназначенная для трехмерного моделирования геофильтрации, в том числе с учетом плотности жидкости, а также с дополнениями, например, MT3D, для моделирования массо- и теплопереноса, MODFLOWP, для решения обратных задач, SUTRA, VS и AIR, предназначенные для изучения фильтрации и массопереноса в зоне аэрации, BIOMOC для моделирования биологических процессов в подземных водах и др.

На наш взгляд, интересным является пакет программ для обработки данных опытных работ (ОФР) AQTESTSS, выполненный в виде серии рабочих тетрадей MS Excel 2000. Каждая тетрадь предназначена для обработки данных ОФР по одному из методов (для напорных, безнапорных, с перетеканием, одиночных, кустовых и т.д.). Имеется и серия тетрадей для обработки данных экспресс-методов. Предусмотрен как метод автоматической «подгонки» зависимости под исходные данные, так и «ручное» перемещение линии графика для визуального подбора наилучшего ее положения.

Особо следует отметить программы для не так широко распространенного, как гидродинамическое, гидрогеохимического моделирования: PHREEQC, PHAST, PHRQPITZ и WATEG. Остановимся на них подробнее.

Так, PHREEQC может использоваться как программа для расчета индексов насыщения и форм нахождения вещества в растворе. Аналитические данные баланса молей могут быть заданы для любой валентности или комбинации валентностей элемента.

Распределение элементов по валентным состояниям может быть основано на спецификации окислительно-восстановительного потенциала либо любой окислительно-восстановительной пары, данные для которой имеются. PHREEQC позволяет уточнять концентрацию элемента до получения равновесного состояния (или заданного индекса насыщения либо парциального давления газа) в указанной фазе. Состав раствора может быть выражен в различных единицах концентрации. При расчете системы взаимодействий программа ориентирована в большей степени на равновесие в системе в целом, чем на равновесие в водном растворе. Неравновесные реакции также могут быть смоделированы, включая смещение водных фаз, указанные оператором изменения состава, кинетически контролируемые равновесия порода–вода и ограниченные кинетически контролируемые реакции в водной фазе. Кислородно-водородный мольный баланс позволяет вычислять массу воды, что дает возможность корректно моделировать реакции с поглощением/выделением воды.

Обобщенная модель двойного слоя [5], модель для вычислений в диффузионном слое [6], а также не электростатическая модель [7] объединены для моделирования поверхностного комплексообразования. Константы поверхностного комплексообразования для двух баз данных, распространяемых вместе с программой, (phreeqc.dat и wateq4f.dat) взяты по данным [5]; константы поверхностного комплексообразования для другой базы данных, распространяемой вместе с программой, (minteq.dat) – из MINTEQA2 [8]. Ионообменные реакции моделируются в соответствии с условиями [9], а константы равновесия взяты по данным [10] и включены в базы данных phreeqc.dat и wateq4f.dat.

Новые возможности модели второй версии включают кинетически контролируемые реакции, реакции в твердых растворах и в газовой фазе постоянного объема. Кинетически контролируемые реакции могут быть определены в целом с помощью вложенного Basic-интерпретатора. Выражения для расчета скоростей реакций, написанные на языке Basic, включаются в состав входного файла, и программа, используя Basic-интерпретатор, вычисляет скорости реакций. Формулировки для идеальных многокомпонентных и неидеальных бинарных твердых растворов также включены в состав модели. Программа позволяет определить равновесный состав неидеального бинарного твердого раствора и существование границы растворимости, а также равновесный состав идеального твердого раствора, включающего два и более компонентов. Имеется возможность моделировать осаждение из перенасыщенного раствора при условии отсутствия осадка в начальный момент времени и полностью растворять твердый осадок. В дополнение к моделированию газовой фазы с постоянным давлением, реализованному в первой версии, здесь также возможно проводить моделирование газовой фазы постоянного объема.

Компьютерная программа PHAST позволяет моделировать многокомпонентный массоперенос с учетом химических взаимодействий в трехмерных потоках подземных вод в зоне полного насыщения. Это универсальное средство для моделирования широкого круга как равновесных, так и неравновесных (кинетических) геохимических задач. Вычисления, связанные с гидродинамикой и массопереносом, основаны на модифицированной версии программы HST3D, ограниченной расчетами для растворов постоянной плотности и температуры. Геохимические вычисления моделируются с помощью алгоритмов программы PHREEQC, внедренных в PHAST.

Программа PHAST применима для изучения как естественных, так и техногенно загрязненных подземных вод в самой широкой постановке, от лабораторных экспериментов до полевых локальных и региональных задач. Она может быть использована при изучении: 1) миграции питательных веществ, неорганических и органических загрязнителей, радионуклидов; 2) ресурсов подземных вод и инженерного восстановления территорий; 3) равновесия порода-вода в естественных условиях. Набор задач, решаемых с помощью программы PHAST, не включает расчеты в зоне частичного насыщения, в многофазных потоках, потоках с переменной плотностью и растворах с высокой ионной силой.

Множество граничных условий, доступных в программе, позволяет моделировать как границы с постоянным напором, известным расходом и фактором перетекания, так и некоторые специфические случаи, связанные с поверхностными водотоками и скважинами. Химические реакции включают: 1) гомогенные равновесия на основе термодинамической модели ионных ассоциаций; 2) гетерогенные равновесия между водными растворами и минералами, газами, сорбционной и ионообменной емкостями, а также твердыми растворами; 3) кинетические химические реакции, скорость которых зависит от состава раствора. Параметры модели (элементы, химические реакции, константы равновесия), минералы, газы, ионообменные и сорбционные емкости, удельные поверхности и кинетические параметры могут определяться или модифицироваться пользователем.

Ряд специальных опций предназначен для сохранения результатов моделирования во внешних файлах. Данные могут быть сохранены в формате: текстового редактора; в форматах, пригодных для обработки табличным процессором либо программами пост-обработки; в формате иерархических данных HDF, который относится к сжатым бинарным. Данные HDF-файла могут быть проанализированы в среде Windows с помощью программы Model Viewer либо извлечены с помощью утилиты PHASTHDF. Обе программы включены в дистрибутив PHAST.

Оператор разделяет задачи гидродинамики, массопереноса и химических реакций в три последовательных вычисления. Никакие итерации между транспортной и химической частями задачи не выполняются. Трехмерная декартова система координат и конечно-разностный метод использованы для пространственной и временной дискретизации процессов гидродинамики и массопереноса. Нелинейные уравнения химических равновесий решаются с помощью метода Ньютона-Рафсона, кинетические дифференциальные уравнения первого порядка интегрируются методом Рунге-Кутты или неявным методом.

Программа PHAST может потребовать значительных ресурсов памяти и длительного времени обработки данных. Для уменьшения этого времени существует версия программы, использующая параллельные вычисления и работающая на многопроцессорных системах или параллельных компьютерах. Параллельная версия требует Message Passing Interface, который на момент написания статьи был доступен свободно. Параллельная версия эффективно уменьшает время вычислений.

Программа PHRQPITZ является модификацией программы PHREEQE, предназначенной для решения задач, связанных с рассолами и сильно концентрированными растворами. Вычисления осуществляются на основе метода Питцера для расчетов коэффициентов активности. Модель позволяет вычислять индексы насыщения, формы миграции, растворимость минералов, смешение растворов, необратимые реакции, а также направление протекания реакций.

Результатами вычислений для каждого раствора являются осмотические коэффициенты, активность воды, индексы насыщения, средние коэффициенты активности для каждого из ионов, ионная сила раствора и pH. БД, прикладываемая к программе, включает параметры Питцера для системы $\text{Na-K-Mg-Ca-H-Cl-SO}_4\text{-OH-HCO}_3\text{-CO}_3\text{-CO}_2\text{-H}_2\text{O}$, дополненную (по литературным данным) такими элементами как Fe(II), Mn(II), Sr, Ba, Li и Вг. БД приведена для температуры 25 °C, но вычисления возможны и для других диапазонов температур.

Программа Wateq, последняя версия WATEQ4F, близка по своим характеристикам к PHREEQE. Ее разработка началась раньше, и она использовалась до наступления эпохи персональных компьютеров. Последняя версия уже адаптирована для PC в версии Windows.

На сайте Агентства по охране окружающей среды (EPA) приведен список из следующих *свободно распространяемых* программ:

2DFATMIC	CHEMFLO	NAPL Simulator	VLEACH
3DFATMIC	GEOEAS	PESTAN	WhAEM
BIOCHLOR	GEOPACK	RETC	WhAEM 2000
BIOPLUME II	HSSM	RITZ	WHPA
BIOPLUME III	MODFLOW	STF	
BIOSCREEN	MOFAT MT3D	UTCHEM	

Среди программ, аналогичных вышеописанным, отметим имитатор NAPL, предназначенный для изучения нефтяных загрязнений.

Сайт Международного центра по гидрогеологическому моделированию предлагает как свободное, так и коммерческое ПО стоимостью в основном от 100 до 1000 долл. (исключая программы, продаваемые пакетами). Свободно распространяемое ПО включает 26 наименований, в том числе уже упоминавшиеся выше MODFLOW версии 2000, MODFLOWP, PHREEQC, SUTRA, MT3DMS, VS2D. Отметим, что на сайте Геологической службы США имеется предупреждение о том, что программы, разработанные ее сотрудниками, лучше брать с оригинального сайта.

Одним из заметных американских сайтов, распространяющих информацию о коммерческих гидрогеологических программах, является <http://www.rockware.com/>. Стоимость пакета VISUAL MODFLOW здесь составляет примерно от 1000 до 10 000 долл., в зависимости от комплектации и количества рабочих мест. Фактически это цена за графическую «упаковку» пакета, так как по всем вопросам, связанным с алгоритмами, пользователи отсылаются на сайт USGS.

Отметим набор рабочих тетрадей формата MS Excel AQTESOLV, предназначенный для обработки данных ОФР, стоимостью 500 долл. В отличие от свободно распространяемого AQTESTSS, в нем реализована методика обработки данных откачки при нестационарном ее режиме по Тэйсу. В AQTESTSS реализованы только методики обработки квазистационарного режима. Интересно, что программа для обработки данных ОФР AqQA, близкая по возможностям к AQTESTSS и выполненная в виде исполняемых файлов, стоит всего 200 долл.

Результаты анализа отечественных сайтов являются заметно более скромными. Информация о свободно распространяемом ПО на них отсутствует. Так, не удалось найти информацию практически ни об одной из разработок, упомянутых в [1]. Исключение составляет сайт ВимСеис Технологии <http://www.vimseis.ru/index.phtml>, на котором предлагаются услуги в рассматриваемом направлении. Так как для контактов указывается сектор математического моделирования ВСЕГИНГЕО, можно предположить, что речь идет о «ССПО Модель» Е. А. Полшкова или каких-то ее модификациях.

Сайт ЗАО ДАР\ВОДГЕО <http://www.darvodgeo.ru/sections/mathmod/vm.html> представляет информацию о том, что «является дистрибьютором самой популярной системы для решения задач фильтрации и массопереноса VISUAL MODFLOW 3.1». Стоимость ее на сайте не указана.

На сайте Esti-map, официального дистрибьютора ГИС-системы MapInfo в России (<http://www.esti-map.ru/pricelist.htm>) предлагается программа Visual Modflow стоимостью 2800 долл. По представленным материалам невозможно определить ни условия инсталляции (разовая, на срок, на одну рабочую станцию и т. д.), ни версию самой программы.

Полная информация о разрабатываемом и используемом ПО была найдена только на сайте Геолинк Консалтинг <http://www.geolink-ltd.com/rus/software/modtech/index.html>, в числе прочих являющейся членом Американской национальной ассоциации подземных вод (National Ground Water Association, <http://www.ngwa.org/gwonline/gwol.cfm>). Отметим, что последняя представляет в Интернет материалы по ГИС и СУБД, но, судя по всему, разработкой специального гидрогеологического ПО не занимается.

Геолинк Консалтинг на своем сайте представляет программную систему для моделирования процессов геофильтрации и массопереноса ModTech. Эта система поставляется в двух вариантах – в первом моделируется трехмерная геофильтрация, во втором геофильтрация и массоперенос. Относительно используемых алгоритмов на сайте прямо указывается, что использованы «расчетные методы пакета MODFLOW, разработанного специалистами Геологической службы США». Отметим еще раз, что на сайте USGS в свободном доступе лежат как скомпилированные модули, так и *исходные коды* программ. Среди них как базовые алгоритмы геофильтрации для MODFLOW, так и различные варианты модулей для расчета массопереноса, как «физической миграции», МОС и МТЗД. В данном случае под «физической миграцией» нами понимается вычислительный эксперимент, не учитывающий химические взаимодействия в системе порода–вода, как, например, это делается в программе PHAST. В данном случае для прогноза распространения загрязнений используются обобщенные коэффициенты, полученные в результате полевых наблюдений за распространяющимся фронтом загрязнения.

Пакет ModTech дополнен конверторами для обмена данными с системами ГИС и СУБД, разработанными в Геолинк Консалтинг. Стоимость разовой покупки первого варианта пакета составляет 1200 долл., второго – 1700 долл.

Никаких упоминаний об использовании программ и алгоритмов моделирования гидрогеохимической миграции в сети Интернет найти не удалось, хотя данное обстоятельство, безусловно, не означает, что этими вопросами

в России никто не занимается. Тем не менее отметим еще раз, что такое положение дел в настоящее время нельзя считать удовлетворительным.

В заключение следует отметить, что реальная апробация вычислительных алгоритмов и программ возможна только при их использовании для различных целей разными специалистами. С этой точки зрения, наиболее прогрессивным, по нашему мнению, является опыт разработчиков Геологической службы США.

Summary

Sennov A. S. On the issue of hydrogeological software using.

The current status of hydrogeological software is considered, in particular on the basis of references cited in Internet. The presented review is actual on March 10, 2006. Some theoretical foundations and recommendations for uses are provided. Particular attention is given to the multi-component, reactive solute transport modeling.

Литература

1. *Букаты М. Б.* Разработка программного обеспечения для решения гидрогеологических задач // Изв. Томск. политех. ин-та. Сер. Геология, поиски и разведка полезных ископаемых Сибири. 2002. Т. 305, вып. 6. 2. *Крайнов С. Р.* Обзор термодинамических компьютерных программ, используемых в США при геохимическом изучении подземных вод. Система компьютеризации научных лабораторий США // Геохимия. 1993. № 5. 3. *Мироненко В. А., Румынин В. Г.* Проблемы гидрогеоэкологии. Т. 1: Теоретическое изучение и моделирование геомиграционных процессов. М., 1998. 4. *Шварц А. А.* Экологическая гидрогеология. СПб., 1996. 5. *Dzombak D. A., Morel F. M. M.* Surface complexation modeling – Hydrous ferric oxide. New York, 1990. 6. *Borcovec M., Westall J.* Solution of the Poisson-Boltzmann equation for surface excesses of ions in diffuse layer at the oxide-electrolyte interface // J. Electroanal. Chem. 1983. Vol. 150. 7. *Davis J. A., Kent D. B.* Surface complexation modeling in aqueous geochemistry // Mineral-water interface geochemistry / Eds.: M. F. Hochella, A. F. White. Washington, D.C., 1990. 8. *Allison J. D., Brown D. S., Novo-Gradac K. J.* MINTEQA2/PRODEF2 – A geochemical assessment model for environmental systems – version 3.0 user's manual: Environmental Research Laboratory, Office of Research and Development, U.S., Athens, Georgia, 1990. 9. *Gaines G. L., Thomas H. C.* Adsorption studies on clay minerals. II. A formulation of the thermodynamics of exchange adsorption // J. of Chem. Phys. 1953. Vol. 21. 10. *Appelo C.A.J., Postma D.* Geochemistry, groundwater and pollution. Rotterdam, 1993.

Статья поступила в редакцию 10 марта 2006 г.